

# Каналы излучательной рекомбинации в Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-наноструктурах

© Ю.А. Берашевич<sup>¶</sup>, А.С. Панфиленок, В.Е. Борисенко

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
220013 Минск, Республика Беларусь

(Получена 22 марта 2007 г. Принята к печати 19 апреля 2007 г.)

С помощью решения 2D уравнения Шредингера установлены закономерности распределения носителей заряда в наноструктурах Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> и изменения эффективности излучательной рекомбинации при переходе от кластеров 2D пирамидальной формы к 3D кластерам куполообразной формы с ростом толщин нанослоев. Учтено влияние состава слоев на эффективность упругого напряжения в структуре и, как следствие, на изменение зон проводимости и валентной зоны Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-наноструктур. При реализации предложенной кинетической модели, описывающей рекомбинационные процессы в кристаллических структурах, обнаружено насыщение интенсивности излучения с увеличением интенсивности накачки, что обусловлено увеличением вклада оже-рекомбинации. Снижение вклада безызлучательной оже-рекомбинации достигается снижением темпа инжекции носителей заряда в кластеры, а именно увеличением концентрации кластеров и увеличением скорости излучательной рекомбинации.

PACS: 78.67.-n, 78.60.Fi

## 1. Введение

Различные наноструктуры, состоящие из тонких слоев материалов с различной шириной запрещенной зоны, вызывают все больший интерес исследователей в связи с возможностью их использования в опто- и наноэлектронике. Одним из видов наноразмерных структур, широко исследуемых в последнее время, являются гетероструктуры Si/Ge. Обнаружение эффективной электролюминесценции в области длин волн 1.5 мкм в этих структурах стимулировало их интенсивные исследования ввиду возможного создания на их основе светоизлучающих устройств для оптоволоконных систем связи, легко интегрируемых с кремниевой технологией изготовления интегральных микросхем [1–6]. Кроме того, было обнаружено, что периодические Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-сверхрешетки могут быть использованы для разработки нанoeлектронных приборов, работающих на эффекте резонансного туннелирования электронов [7,8].

Осаждение слоев германия на (001) Si в зависимости от технологических режимов приводит к образованию упругонапряженных нанослоев Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> или самоорганизации Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-островков различной формы, а именно пирамидальных кластеров или кластеров куполообразной формы [1–6]. Отсутствие дислокаций на границах раздела материалов, проявление квантового размерного эффекта и возможность реализации квазипрямозонных переходов локализованных носителей заряда делает эти структуры наиболее перспективными для оптоэлектроники. Как показали экспериментальные исследования [1–2], спектр фотолюминесценции Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-наноструктур характеризуется наличием нескольких максимумов с энергиями 0.75–0.85, 0.9–1.05 и 1.1 эВ, что характерно для нескольких каналов рекомбинации. Однако неоднозначность объяснения появления данных максимумов в различных работах [3–6]

и необходимость определения параметров структуры для увеличения эффективности светоизлучения требуют теоретического исследования процессов рекомбинации в Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-наноструктурах.

Цель данной работы — теоретический анализ эффективных каналов межзонной рекомбинации в наноразмерных Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-сверхрешетках и наноструктурах и поиск путей увеличения эффективности излучательной ее части.

## 2. Модель

Технология изготовления Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> наноразмерных структур заключается в выращивании Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-слоев молекулярно-лучевой эпитаксией, которые до толщин Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> в 3–4*a*, где *a* — постоянная решетки, представляют собой напряженные слои, которые при превышении критического размера самоорганизуются в кристаллические наноструктуры. При толщинах слоев свыше 4*a* образуются 2D кластеры пирамидальной формы, а при толщинах свыше 6–7*a* начинают образовываться 3D кластеры куполообразной формы [1–3]. Высота этих кластеров варьируется в пределах 2–6 нм, в зависимости от толщины осажденного слоя Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>. Пространство между двумя кластерами заполнено разделительным слоем толщиной не более 2 нм. Типичные размеры образованных пирамидальных кластеров составляют 5–6 нм в высоту и 30–50 нм в ширину, в то время как кластеры куполообразной формы имеют диаметр свыше 50 нм. Для адекватного теоретического описания излучательной рекомбинации носителей заряда в Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-наноструктурах рассмотрим экспериментально наблюдаемые спектры фотолюминесценции.

Наличие нескольких областей квантования носителей заряда различной эффективности в упругонапряженных кристаллических слоях Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> обуславливает появление нескольких пространственно-разделенных

<sup>¶</sup> E-mail: julia@nano.bsuir.edu.by, julia@physics.umanitoba.ca

каналов рекомбинации при фотовозбуждении носителей заряда в этих структурах. В спектре фотолюминесценции Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-наноструктур первый широкий пик с энергией 0.75–0.85 эВ приписывался изначально излучательной рекомбинации электронов, локализованных в Si потенциальной яме, с дырками, локализованными в Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> [1–2]. Однако невысокая энергия межзонных переходов поставила под сомнение вывод об излучательной рекомбинации зона–зона в данном спектре энергий, так как высокая эффективность квантования в наноразмерных слоях Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> и Si предполагает излучательную рекомбинацию при более высокой энергии. Проведенные недавно экспериментальные исследования фотолюминесценции структур Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> [3] показали наличие данного пика как в этих структурах, так и в структурах со слоем Si, заменяющего Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>. Это дало основание сделать заключение о наличии точечных дефектов, образующихся при низкотемпературной эпитаксии и участвующих в безызлучательной рекомбинации носителей заряда.

Спектр фотолюминесценции в диапазоне энергий 0.9–1.05 эВ характеризуется двумя максимумами, отстоящими друг от друга на 57–58 мэВ, что соответствует энергии фононов в кремнии. Фотосигнал в данной области спектра в работах [1–3,5–6] отождествляется с бесфононной рекомбинацией зона–зона и рекомбинацией зона–зона с испусканием поперечного оптического фонона. Эта область проявляется на образцах с толщиной Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-слоев менее 3.5*a* и более 5*a*. При промежуточном размере слоев, что соответствует переходу от 2D к 3D структурам, спектр характеризуется широким пиком низкой интенсивности. Образование макрокластеров при толщинах Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-слоя более 5*a* также приводит к появлению пиков слабой интенсивности в области энергий 0.75–0.85 эВ. Третья область спектра с ярко выраженным узким пиком с энергией 1.1 эВ приписывается рекомбинации связанных экситонов с испусканием поперечного оптического фонона в Si-подложке [1–6].

Наиболее интересной для нашего исследования представляется рекомбинация носителей заряда с испусканием поперечного оптического фонона, соответствующая фотолюминесценции в диапазоне энергий 0.9–1.05 эВ, которую определяют квазипрямозонные переходы локализованных носителей заряда между зоной проводимости в Si и валентной зоной в Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>. В Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-наноструктурах области кремния выполняют роль квантовых ям в зоне проводимости и квантовых барьеров в валентной зоне. Энергетическая диаграмма такой структуры и возможные переходы зона–зона представлены на рис. 1. Акты рекомбинации совершаются за счет квазипрямозонных переходов электронов, локализованных в квантовых ямах кремния в точке Δ, в квантовую яму в валентной зоне в точке Γ, образованной Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>. Упругие напряжения в такой гетероструктуре приводят к расщеплению зоны проводимости на две долины вдоль оси (001), обозначенные нами как Δ<sub>2</sub>, и четыре долины вдоль осей (100) и (010), обозначенные как Δ<sub>4</sub> [8].

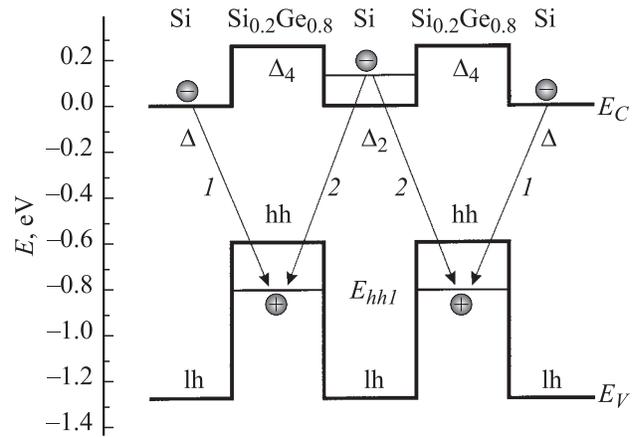


Рис. 1. Энергетическая диаграмма периодической наноразмерной Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-структуры и каналы рекомбинации в ней: 1 — переход зона–зона типа 1, 2 — переход зона–зона типа 2.

При этом потенциальный профиль в гетероструктуре Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> определяется для ямы зонами Δ<sub>2</sub>, а для барьера зонами Δ<sub>4</sub>. На контактах структуры, являющихся ненапряженными, потенциальный профиль определяется зонами Δ [9,10]. Для валентной зоны дно квантовой ямы Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> определяется зоной тяжелых дырок (hh), а высота потенциального барьера в Si-слое — зоной легких дырок (lh). Скорость квазипрямозонного перехода может быть определена из вероятности перехода [11,12]:

$$\frac{1}{\tau_R} = \frac{8\pi}{3} \frac{q^2}{\epsilon_0 h^2 m_0^2 c^3} (E_e - E_h) |\langle \varphi_e | p | \varphi_h \rangle|^2, \quad (1)$$

где *q* — заряд электрона, *h* — постоянная Планка, *c* — скорость света в вакууме, *m*<sub>0</sub> — масса электрона, ε<sub>0</sub> — абсолютная диэлектрическая проницаемость вакуума, (E<sub>e</sub> – E<sub>h</sub>) — энергия перехода, |⟨φ<sub>e</sub> | *p* | φ<sub>h</sub>⟩| — дипольный матричный элемент фундаментального перехода из начального состояния электрона с импульсом *p* в зоне проводимости |φ<sub>e</sub>⟩ в его конечное состояние |φ<sub>h</sub>⟩ в валентной зоне.

Значение дипольного матричного элемента квазипрямозонного перехода зона–зона может быть найдено с помощью решения уравнения Шредингера для потенциального профиля зоны проводимости и валентной зоны в исследуемой гетероструктуре Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> (рис. 1). Форма Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-нанокластеров влияет на квантовое ограничение дырок, которое может происходить как в нанокластерах в направлении их роста, так и в разделительных слоях между нанокластерами. В то же время в слоях кремния квантовое ограничение электронов имеет место в области слоя, покрывающего верхнее основание Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-кластеров. Поэтому учет эффектов квантования в различных областях структуры и перекрывание волновых функций электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне находили с помощью решения

2D уравнения Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{1}{m_{e(h)}(y)} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{m_{e(h)}(z)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi_{e(h)}(y, z) + \Delta E_{C(V)}(y, z) \psi_{e(h)}(y, z) = E_{e(h)} \psi_{e(h)}(y, z), \quad (2)$$

где  $y$  — направление вдоль роста нанокластеров;  $z$  — поперечное направление;  $\hbar$  — приведенная постоянная Планка;  $m_{e(h)}(y)$ ,  $m_{e(h)}(z)$  — эффективная масса электрона (дырки) ( $m_{e(h)}(y)$ ,  $m_{e(h)}(z)$ );  $\Delta E_{C(V)}(y, z)$  — потенциальный профиль зоны проводимости (валентной зоны) вдоль направлений  $y$  и  $z$ , расчет которого подробно описан в работах [9,10] с учетом эффекта упругого напряжения в наноструктурах;  $\psi_{e(h)}(y, z)$  — волновые функции электрона (дырки) вдоль направлений  $y$  и  $z$ ;  $E_{e(h)}$  — энергия электрона (дырки). Решение 2D уравнения Шредингера позволяет учесть влияние высоты и толщины кластеров на положение нижних уровней энергии в квантовых ямах в зоне проводимости и в валентной зоне структуры, представленной на рис. 1.

Рассмотрим более подробно механизм возбуждения и рекомбинации носителей заряда в наноразмерных кластерах. В диапазоне энергий 0.9–1.05 эВ имеется два возможных канала рекомбинации: излучательная с испусканием поперечного оптического фона, характеризующаяся временем  $\tau_R$ , и бесфононная с временем  $\tau_{NF}$ . При этом полное характеристическое время излучательного перехода определяется по правилу суммирования обратных величин:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_R} + \frac{1}{\tau_{NF}}. \quad (3)$$

Для моделирования предполагаем отсутствие безызлучательных рекомбинационных центров в запрещенной зоне материалов ввиду высокой эффективности напряжения нанослоев в Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-структурах. Кроме рекомбинации типа зона–зона в нанокластерах имеет место безызлучательная оже-рекомбинация, эффективность которой растет с увеличением темпа инжекции носителей заряда в кластеры [1]. Инжекция одного носителя заряда, например электрона, в нанокластер благодаря кулоновскому взаимодействию между инжектированным электроном и наведенным этим электроном полем приводит к значительному росту энергии электрона. При инжекции 2-го электрона в кластер, уже содержащий один электрон, увеличение энергии может достигать, в зависимости от размера кластера и диэлектрической проницаемости матрицы, 1–2 эВ, что делает инжекцию второго электрона крайне маловероятной. Однако инжекция дырки в кластер, уже содержащий электрон, приводит к компенсации заряда за счет кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой, и инжекция 3-го носителя заряда в кластер становится возможной. Наличие трех носителей заряда в кластере ведет к быстрой безызлучательной оже-рекомбинации ввиду высокой локальной плотности носителей заряда. Поэтому вкладом кластеров, содержащих более трех носителей

заряда, можно пренебречь. Ограничимся рассмотрением наноразмерных кластеров, не содержащих носителей заряда  $N_0^0$ , имеющих один электрон  $N_0^n$  или дырку  $N_p^0$ , два носителя заряда противоположного знака  $N_p^n$ , а также два носителя электрона и одну дырку  $N_p^{2n}$  или две дырки и один электрон  $N_{2p}^n$ . Плотность всех нанокластеров в слое Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> достигает значений  $10^{14}$ – $10^{16}$  м<sup>-2</sup> и определяется суммой:

$$N_{\text{SUM}} = N_0^0 + N_0^n + N_p^0 + N_p^n + N_p^{2n} + N_{2p}^n. \quad (4)$$

Для моделирования использовалась система кинетических уравнений [13,14], учитывающая процессы инжекции и рекомбинации носителей заряда в кластерах  $N_0^0$ ,  $N_0^n$ ,  $N_p^0$ ,  $N_p^n$ ,  $N_p^{2n}$ ,  $N_{2p}^n$ . Темп инжекции электронов и дырок в кластер при фотовозбуждении может быть определен как

$$G_n = G_p = \frac{I_{\text{ex}}}{\hbar\omega \cdot N_{\text{SUM}}}, \quad (5)$$

где  $I_{\text{ex}}$  — интенсивность накачки ( $1 - 10^5$  Ватт/м<sup>2</sup>),  $\hbar\omega$  — энергия возбуждения, в то время как интенсивность электролюминесценции определяется из соотношения [14]

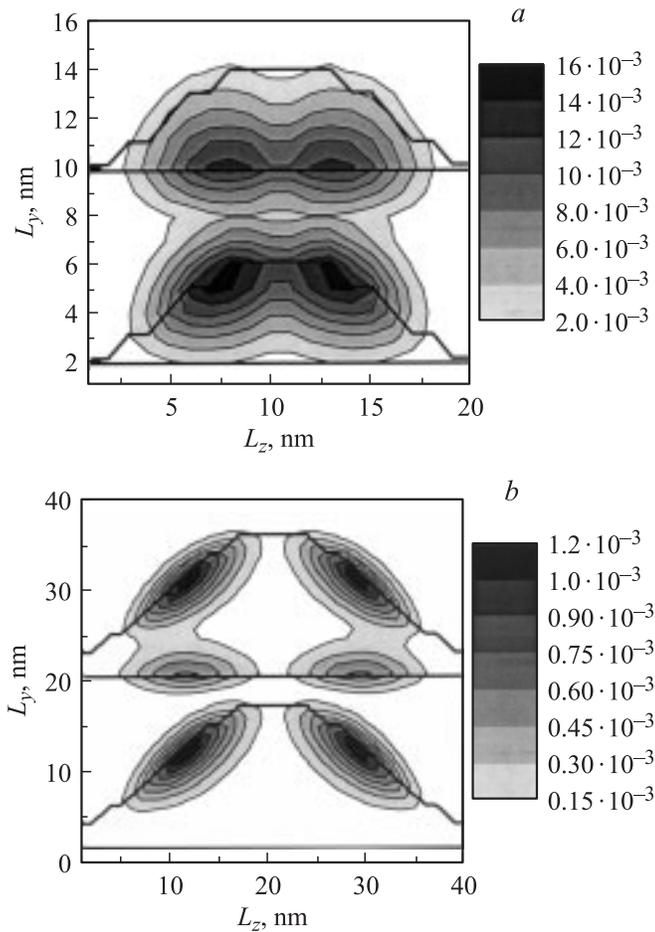
$$I_{\text{rad}} = \frac{N_p^n \hbar\omega}{\tau_R}. \quad (6)$$

Решение 2D стационарного уравнения Шредингера позволит определить как пространственное распределение электронов и дырок в Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-наноструктурах, области с наибольшей эффективностью квазипрямозонных переходов, так и влияние геометрических параметров структуры и состава слоев на время рекомбинации с испусканием поперечного оптического фона. Решение системы уравнений [13,14] для стационарного случая, учитывающей инжекцию носителей заряда в нанокластеры и наличие рекомбинации зона–зона наряду с безызлучательной оже-рекомбинацией, позволяет определить возможную интенсивность излучения структуры и влияние различных факторов на нее.

Эффективность упругого напряжения в слоях кремния и Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> и доля содержания германия ( $x$ ) в Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>, который отличается более узкой запрещенной зоной по сравнению с кремнием, определяет расщепление зон, высоты барьеров на границе раздела Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> и Si, эффективные массы подвижных носителей заряда в различных слоях. Эти параметры были определены в рамках теории твердого тела на основе модели, представленной в работах [9,10], где учитывается влияние состава слоев на эффективность упругого напряжения в структуре и, как следствие, на изменение зон проводимости и валентной зоны.

### 3. Результаты моделирования и их обсуждение

Как видно из рис. 1, переход 1 характеризуется меньшей энергией относительно перехода 2, при котором рост энергии электрона в потенциальной яме кремния

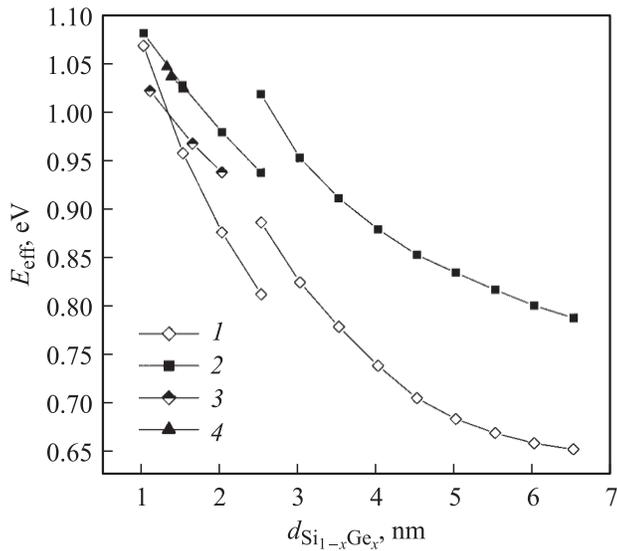


**Рис. 2.** Перекрывание волновых функций электронов и дырок  $\langle \psi_e | \psi_h \rangle$  в структуре Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>/Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>/Si ( $x = 0.8$ ): *a* — для кластеров Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> пирамидальной формы ( $d_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x} = 6$  нм,  $\tau^{-1} = 3.68 \cdot 10^6$  с<sup>-1</sup>), где  $\langle \psi_e | \psi_h \rangle$  варьируется от  $2 \cdot 10^{-3}$  до  $1.6 \cdot 10^{-2}$  (серая шкала), и *b* — для кластеров Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> куполообразной формы ( $d_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x} = 18$  нм,  $\tau^{-1} = 4.27 \cdot 10^3$  с<sup>-1</sup>), где  $\langle \psi_e | \psi_h \rangle$  варьируется от  $1.5 \cdot 10^{-4}$  до  $1.2 \cdot 10^{-3}$ .

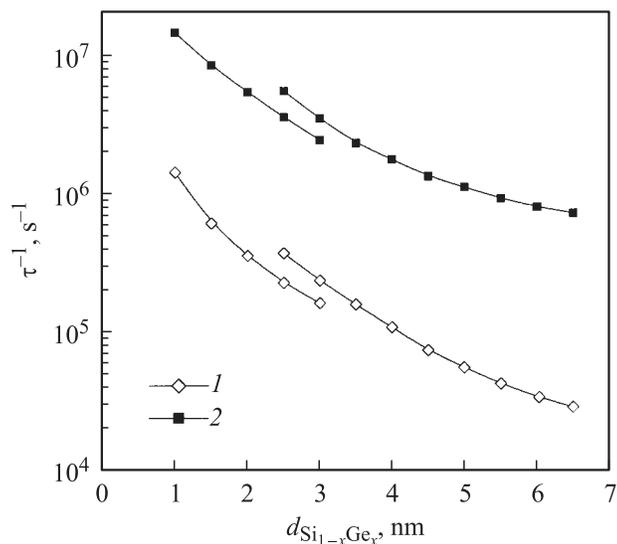
осуществляется за счет эффекта квантового ограничения. В Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>/Si-структурах, которые экспериментально исследовались во многих работах [4–6,15] и характеризуются отсутствием потенциальных ям для электронов, присутствует только переход зона–зона 1. Поскольку при наращивании Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-слоев на Si-подложке экспериментально наблюдается переход от тонких слоев ( $< 3\text{--}4a$ ) к 2D и 3D Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> нанокристаллическим структурам, а также не исключается наличие разделительных слоев  $< 3\text{--}4a$  в пространстве между кластерами, два вида композиции представляют интерес для моделирования рекомбинации зона–зона в Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-структурах, а именно Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-сверхрешетки с толщиной слоя Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> не более 2.5 нм и Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-структуры с нанокластерами пирамидальной (4–6*a*) и куполообразной формы (свыше 6*a*).

Распределение плотности как электронов, так и дырок в Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-структурах определяет эффективность рекомбинации зона–зона в различных областях структуры. Как показали результаты моделирования, в планарной Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>/Si-структуре с толщинами слоев Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> менее 1.5 нм эффективность рекомбинации максимальна в середине Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-слоя, а с ростом его толщины происходит локализация каналов рекомбинации по краям Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-слоя. В структурах с нанокластерами пирамидальной формы, в которых локализация и квантование энергии дырок происходят по всему объему Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-кластера с максимумом в его центре, а электронов — в областях между двумя Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-кластерами в планарном слое кремния, эффективность рекомбинации высока по всему объему кластера и максимальна в вершине кластера и в его основании. Результаты расчета перекрывания волновых функций электронов и дырок для кластера высотой  $L_y = 6$  нм и шириной  $L_z = 20$  нм представлены на рис. 2, *a*. Значения энергий для электронов и дырок (энергия дискретного уровня для электронов и дырок относительно дна квантовой ямы) равны соответственно  $E_e = 0.1$  эВ,  $E_h = 0.13$  эВ. Как показывают результаты моделирования, представленные на рис. 2, *b* для кластеров куполообразной формы, диаметр которых на десятки нанометров превышает размеры пирамидальных кластеров, эффект квантования энергии носителей заряда практически исчезает ( $E_e = 0.024$  эВ,  $E_h = 0.039$  эВ для кластера высотой  $L_y = 18$  нм и шириной  $L_z = 40$  нм). При этом области эффективной рекомбинации электронов и дырок локализуются на гранях и в основании кластеров.

Низкая эффективность рекомбинации зона–зона в кластерах куполообразной формы делает их наименее привлекательными для дальнейших исследований, вследствие чего остановимся на результатах моделирования для кластеров пирамидальной формы и для Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-сверхрешеток. Результаты моделирования (для Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>/Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>/Si-структуры) зависимости эффективной ширины запрещенной зоны  $E_{\text{эф}} = E_g + E_e + E_h$ , где  $E_g$  — ширина запрещенной зоны между дном зоны проводимости кремния и потолком валентной зоны Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> ( $E_g = 0.52\text{--}0.56$  эВ [15]), от толщины слоя Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> представлены на рис. 3 для двух типов переходов (переходов 1 и 2, как обозначено на рис. 1). При моделировании предполагалось, что при толщинах слоев  $d_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x} \leq 2.5$  нм в структурах слой Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> являются планарными, а свыше этой критической толщины происходит образование кластеров пирамидальной формы. Толщина контактных слоев кремния  $d_{\text{кон}}$  принималась равной 10 нм для обеспечения учета перехода 1 при моделировании. Результаты расчета зависимости эффективной ширины запрещенной зоны от толщины Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> нанослоев хорошо согласуются с экспериментальными данными, которые также представлены на рис. 3. Однако зависимость состава Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-слоев от технологических режимов их получения, что в свою очередь влияет на энергетические зазоры зон



**Рис. 3.** Зависимость ширины  $E_{\text{eff}}$  от толщины  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ -слоев для  $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ -структур ( $x = 0.8$ ,  $d_{\text{Si}} = 2$  нм): 1 — переход 1; 2 — переход 2; 3 — экспериментальные данные [1]; 4 — экспериментальные данные [3].



**Рис. 4.** Изменение темпа рекомбинации ( $\tau^{-1}$ ) с ростом толщины  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ -слоев для  $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ -структур ( $x = 0.8$ ,  $d_{\text{Si}} = 2$  нм): 1 — переход 1; 2 — переход 2.

проводимости и валентных зон в исследуемых структурах [9,10], не позволяет проводить более детальное сравнение экспериментальных данных и результатов моделирования.

С ростом толщины слоев, кроме снижения эффективной ширины запрещенной зоны, снижается также и перекрытие волновых функций электронов, локализованных в зоне проводимости, и дырок, локализованных в валентной зоне  $\langle \psi_e | \psi_h \rangle$ , а соответственно снижается и темп рекомбинации  $\tau^{-1}$ . Результаты моделирования этой зависимости представлены на рис. 4.

Рост числа слоев в  $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ -сверхрешетках приводит к снижению эффективности рекомбинации за счет снижения локализации носителей заряда в квантовых ямах, из-за размывания их волновых функций по всем квантовым ямам структуры. Вследствие этого увеличение числа слоев приводит как к уменьшению перекрытия волновых функций электронов и дырок  $\langle \psi_e | \psi_h \rangle$  и уменьшению  $E_{\text{eff}}$ , так и к быстрому росту времени рекомбинации зона-зона в  $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ -сверхрешетках. Такая же картина наблюдается для структур, содержащих нанокластеры. Результаты моделирования зависимости  $E_{\text{eff}}$ ,  $\langle \psi_e | \psi_h \rangle$  и времени рекомбинации от числа периодов структуры представлены в табл. 1. Для снижения влияния перехода типа 1 с контактов структуры при моделировании рекомбинации зона-зона толщина контактов  $d_{\text{con}}$  принималась равной 1 нм, что приводит к увеличению эффективности квантования энергии носителей заряда на контактах структуры, сдвигу энергетических уровней в область высоких энергий и при моделировании перехода типа 2 позволяет не учитывать вклад перехода типа 1.

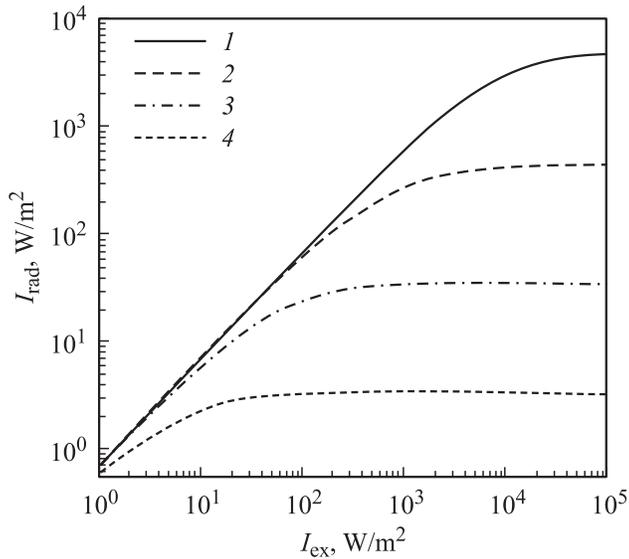
Изменение состава слоев  $x$  приводит к изменению потенциального профиля для электронов и дырок в  $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ -структурах [9], а именно рост  $x$  приводит к увеличению энергетического зазора между зоной проводимости и валентной зоной двух материалов на границе

**Таблица 1.** Параметры, характеризующие рекомбинацию носителей заряда в  $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ -сверхрешетках с различным числом периодов ( $x = 0.8$ ,  $d_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x} = 2$  нм,  $d_{\text{Si}} = 2$  нм,  $d_{\text{con}} = 1$  нм)

$N$	$E_{\text{eff}}$ , эВ	$\langle \psi_e   \psi_h \rangle$	$\tau^{-1}$ , $\text{с}^{-1}$
2	1.087	0.664	$7.48 \cdot 10^6$
3	0.952	0.3856	$1.94 \cdot 10^6$
4	0.920	0.2772	$9.35 \cdot 10^5$
5	0.907	0.2148	$5.46 \cdot 10^5$
6	0.899	0.158	$2.9 \cdot 10^5$
7	0.896	0.147	$2.48 \cdot 10^5$
8	0.894	0.129	$1.93 \cdot 10^5$
9	0.892	0.113	$1.45 \cdot 10^5$
10	0.891	0.089	$1.05 \cdot 10^5$

**Таблица 2.** Параметры, характеризующие рекомбинацию носителей заряда в  $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ -сверхрешетках с различным составом  $x$  ( $d_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x} = 6$  нм,  $d_{\text{Si}} = 2$  нм,  $N = 2$ ,  $d_{\text{con}} = 1$  нм)

$x$	$E_{\text{eff}}$ , эВ	$\langle \psi_e   \psi_h \rangle$	$\tau^{-1}$ , $\text{с}^{-1}$
0.2	0.5812	0.8851	$1.52 \cdot 10^7$
0.3	0.6112	0.7943	$1.35 \cdot 10^7$
0.4	0.6376	0.6968	$1.13 \cdot 10^7$
0.5	0.6625	0.5958	$8.97 \cdot 10^6$
0.6	0.6846	0.4945	$6.6 \cdot 10^6$
0.7	0.7055	0.4012	$4.61 \cdot 10^6$
0.8	0.7227	0.3205	$3.05 \cdot 10^6$



**Рис. 5.** Зависимость интенсивности излучения Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-наноструктур от интенсивности накачки при  $\tau_R$ , с: 1 —  $10^{-7}$ , 2 —  $10^{-6}$ , 3 —  $10^{-5}$ , 4 —  $10^{-4}$ .

раздела. Как следствие, растет эффективная ширина запрещенной зоны  $E_{\text{эф}}$ , однако перекрывание волновых функций  $\langle \psi_e | \psi_h \rangle$  медленно уменьшается за счет уменьшения площади локализации электронов и дырок по структуре с ростом высот потенциальных барьеров, несмотря на рост эффективности локализации носителей заряда. При этом скорость роста  $E_{\text{эф}}$  ниже скорости убывания перекрывания волновых функций, что приводит к росту времени рекомбинации электронов и дырок в таких структурах. Результаты моделирования для Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-наноструктур представлены в табл. 2. При этом в Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-сверхрешетках скорость роста  $E_{\text{эф}}$  выше скорости убывания перекрывания волновых функций, что приводит к незначительному снижению времени рекомбинации в 1.6 раз, при изменении  $x$  от 0.2 до 0.8.

Моделирование зависимости интенсивности фотоизлучения от интенсивности накачки для Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-наноструктур проводили, решая систему уравнений [14] для стационарного случая с учетом распределения генерируемых носителей заряда по Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-кластерам. Результаты моделирования представлены на рис. 5. Предполагалось, что концентрация кластеров равна  $N_{\text{SUM}} = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ , время безызлучательной оже-рекомбинации  $\tau_A = 10^{-9} \text{ с}$  [16]. Так как время бесфоновой рекомбинации зона-зона является функцией размера кластера и может изменяться от  $10^{-8} \text{ с}$  для слоев  $\sim 1 \text{ нм}$  до  $10^{-3} \text{ с}$  для толщин свыше 6 нм [17], предполагаем  $\tau_{NF} = \tau_R$ . Установлено, что с увеличением интенсивности накачки  $I_{\text{ex}}$  наблюдается область насыщения интенсивности излучения, что связано с ростом скорости генерации носителей заряда в Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-нанокластерах. Это ведет в свою очередь к увеличению концентрации кластеров, содержащих три носителя за-

ряда  $N_p^{2n}$  и  $N_{2p}^n$ , и к росту вклада безызлучательной оже-рекомбинации. Причем чем меньше время излучательной рекомбинации, тем при больших значениях величины  $I_{\text{ex}}$  наступает область насыщения из-за роста вклада оже-рекомбинации при конкуренции этих двух процессов. Уменьшение концентрации кластеров ведет к увеличению темпа инжекции носителей заряда в кластеры и соответственно к увеличению вклада оже-рекомбинации. Так, при концентрации кластеров  $N_{\text{SUM}} = 10^{14} \text{ м}^{-2}$  интенсивность излучения  $I_{\text{ex}}$  входит в режим насыщения при  $I_{\text{rad}} = 10^2 \text{ Вт/м}^2$  и достигает значения  $I_{\text{ex}} = 4 \text{ Вт/м}^2$  для  $\tau_R = 10^{-7} \text{ с}$ .

Кроме того, если при увеличении толщин нанослоев в Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-наноструктурах от  $d_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x} = 6 \text{ нм}$  до  $d_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x} = 18 \text{ нм}$  время рекомбинации изменяется от  $\tau = 2.71 \cdot 10^{-7} \text{ с}$  до  $\tau = 2.34 \cdot 10^{-4} \text{ с}$  (рис. 2), то, как показывают результаты моделирования, интенсивность излучения  $I_{\text{rad}}$  при высокой интенсивности накачки  $I_{\text{ex}}$  может уменьшиться практически в  $10^4$  раз (рис. 5). Можно предположить, что такое значительное снижение интенсивности излучения зачастую не позволяет экспериментально фиксировать фотосигнал на спектрах фотолюминесценции Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-наноструктур, когда толщина слоя Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> увеличивается [1–3].

## 4. Заключение

Модель, основанная на решении 2D уравнения Шредингера и, кроме того, учитывающая влияние состава слоев на эффективность упругого напряжения в структуре и, как следствие, на изменение зон проводимости и валентной зоны, была применена для исследования эффективности излучательной рекомбинации в наноструктурах Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>. На основании результатов моделирования показано, что для кластеров пирамидальной формы и смачивающих слоев характерно протекание излучательной рекомбинации зона-зона с временами порядка  $10^{-7} \text{ с}$  по всему объему кластера или нанослоя. Для кластеров куполообразной формы, латеральные размеры которых достигают значений 50 нм и выше, каналы излучательной рекомбинации локализируются на гранях кластера и характеризуются временами  $10^{-3} \text{ с}$ . Установлено, что рост числа слоев в Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-структурах ведет к делокализации волновых функций электронов и дырок по слоям и соответственно к снижению эффективности рекомбинации всей структуры, в то время как изменение состава слоев если и приводит к росту энергии перехода с увеличением содержания Ge в Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>, то на скорость рекомбинации оказывает незначительное влияние. Интенсивность светоизлучения в исследованных структурах линейно растет с интенсивностью накачки, переходя в режим насыщения за счет увеличения вклада оже-рекомбинации с ростом темпа инжекции носителей заряда в кластеры.

Работа выполнена при финансовой поддержке точно-западной программы научной кооперации в рамках проекта INTAS N YSF 2002-139 (<http://www.intas.be/>) и в рамках проекта Ф04-4047, финансируемого Фондом фундаментальных исследований Республики Беларусь.

## Список литературы

- [1] V. Yam, Vinh Le Thanh, Y. Zheng, P. Boucaud, D. Bouchier. *Phys. Rev. B*, **63**, 033 313 (2001).
- [2] P. Boucaud, S. Sauvage, M. Elkurdi, E. Mercier, T. Brunhes, V. Le Thanh, D. Bouchier. *Phys. Rev. B*, **64**, 155 310 (2001).
- [3] T.K. Nguyen-Duc, V. Le Thanh, L.H. Nguyen, F.A. d'Avitaya, J. Derrien. *J. Vac. Sci. Tech. B*, **20** (3), 1251 (2002).
- [4] O.G. Schmidt, C. Lange, K. Eberl. *Appl. Phys. Lett.*, **75**, 1905 (1999).
- [5] Л.К. Орлов, Ж.Й. Хорват, А.В. Потапов, М.Л. Орлов, С.В. Ивин, В.И. Вдовин, Э.А. Штэйрман, В.М. Фомин. *ФТТ*, **46**, 2069 (2004).
- [6] Т.М. Бурбаев, В.А. Курбатов, А.О. Погосов, М.М. Рзаев, Н.Н. Сибельдин, В.А. Цветков. *ФТТ*, **46**, 74 (2004).
- [7] D.J. Paul, P. See, I.V. Zozoulenko, K.-F. Berggren, B. Kabius, V. Hollaender, S. Mantl. *Appl. Phys. Lett.*, **77**, 1653 (2000).
- [8] J.A. Berashevich, J.-L. Lazzari, V. Le Thanh, F. Arnaud d'Avitaya. *Physics Chemistry and Application of Nanostructures* (Minsk, Belarus, 2005) p. 548.
- [9] F. Ben Zid, A. Bhouiri, H. Mejri, R. Tlili, M. Said, J.-L. Lazzari, F. Arnaud d'Avitaya, J. Derrien. *J. Appl. Phys.*, **91**, 9170 (2002).
- [10] J.A. Berashevich, V.E. Borisenko, J.-L. Lazzari, F. Arnaud d'Avitaya. *Phys. Rev. B* (2007).
- [11] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупроводников* (М., Наука, 1977) т. 1, с. 588–591.
- [12] N. Sfina, J.-L. Lazzari, J. Derrien, F. Arnaud d'Avitaya, M. Said. *Eur. Phys. J. B, Condens. Matt. Phys.*, **48**, 151 (2005).
- [13] J.A. Berashevich, A.L. Danilyuk, A.N. Kholod, V.E. Borisenko. *Mater. Sci. Engin. B*, **101**, 111 (2003).
- [14] Ю.А. Берашевич, Б.В. Каменев, В.Е. Борисенко. *ФТТ*, **36**, 221 (2002).
- [15] N. Sfina, J.-L. Lazzari, F. Ben Zid, A. Bhouiri, M. Said. *Opt. Mater.*, **27** (5), 859 (2005).
- [16] D. Kovalev, H. Hecler, G. Polisski, F. Koch. *Phys. Status Solidi B*, **215**, 871 (1999).
- [17] А.В. Саченко, Ю.В. Крюченко, И.О. Соколовский, О.М. Сресели. *ФТП*, **38**, 877 (2004).

Редактор Л.В. Беляков

## The radiative recombination channels in the Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> nanostructures

J.A. Berashevich, A.S. Panfilenok, V.E. Borisenko

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics,  
220013 Minsk, Belarus

**Abstract** The regularity of the charge distribution in the Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> nanostructures and dependences of the effective radiative recombination at the transition of 2D pyramidal clusters to 3D dome-shaped clusters have been established with 2D Schrödinger equation. The influence of the composition of the strained Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> layers on the conduction and valence bands of these layers have been taken into account. The saturation of the dependence of radiation intensity on pump excitation due to the increasing of the Auger recombination contribution has been observed. This behavior has been investigated based on simulation of the recombination processes in the clusters with the kinetic model. It has been found that a reduction of the non-radiative Auger recombination can be achieved with the decreasing of charge carrier injecting temp to the clusters, namely by an increasing of the cluster concentration and the radiative recombination rate.