

считать наиболее благоприятной средой для измельчения, поскольку порошок, измельченный в толуоле в течение 12 ч и отожженный при 1000 °С в течение 1 ч, обладал наибольшим энергетическим произведением $(BH)_{\max} \approx 9,6$ МДж/м³. При этом его коэрцитивная сила составляла $\mu_0 H_{ci} \approx 0,43$ Тл, а остаточная намагниченность $\mu_0 I_r \approx 0,24$ Тл.

Библиографический список

1. Лютюк, Л. М. Технология ферритовых материалов магнетроники / Л. М. Лютюк, В. Г. Костишин, А. В. Гончар. – М. : МИСиС, 2005. – 353 с.
2. Ketov, S. V. Structure and magnetic properties of nanocrystalline SrFe₁₂O₁₉ alloy produced by high-energy ball milling and

annealing / S. V. Ketov, Yu. D. Yagodkin, A. L. Lebed, Yu. V. Chernopyatova, K. Khlopkov // J. Magn. Magn. Mater. – 2006. – V. 300, Iss. 1. – P. e479—e481.

3. Ketov, S. V. Structure and magnetic properties of strontium ferrite anisotropic powder with nanocrystalline structure / S. V. Ketov, Yu. D. Yagodkin, V. P. Menushenkov // J. Alloys and Compd. – 2011. – V. 510. – P. 1065—1068.

4. Шелехов, Е. В. Программы для рентгеновского анализа поликристаллов / Е. В. Шелехов, Т. А. Свиридова // Металловедение и термическая обработка металлов. – 2000. – № 8. – С. 16—19.

5. Rezlescu, L. Magnetic glass-ceramic containing fine ferrite crystals / L. Rezlescu, E. Rezlescu, M. L. Craus, N. J. Rezlescu // J. Magn. and Magn. Materials. – 1999. – V. 196—197. – P. 463—464.

6. Тикадзуме, С. Физика ферромагнетизма. Магнитные свойства вещества. / С. Тикадзуме – М. : Мир, 1988. – 304 с.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки (ГК № 14.513.11.0026 от 18 марта 2013 г.).

УДК 621.315.592

О ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК КРЕМНИЯ

© 2012 г. С. Н. Нагорных, В. И. Павленков, А. Н. Михайлов, А. И. Белов, В. А. Бурдов, Л. В. Красильникова*, Д. И. Крыжков*, Д. И. Тетельбаум
 Научно-исследовательский физико-технический институт
 Нижегородского государственного университета имени Н. И. Лобачевского,
 *Институт физики микроструктур РАН

Представлена модель излучательных и безызлучательных переходов в квантовых точках кремния, которая описывает температурную зависимость фотолюминесценции ионно-синтезированных массивов нанокристаллов Si в SiO₂. Рассмотрена четырехуровневая схема переходов, учитывающая термоактивированные процессы и обменное расщепление основного энергетического состояния экситона в нанокристалле кремния на триплетный и синглетный уровни, переходы с которых в основное состояние ответственны за люминесценцию. На основе стационарного решения системы кинетических уравнений, описывающих заселенность уровней, получено выражение для температурной зависимости монохроматических составляющих фотолюминесценции, которое удовлетворительно описывает экспериментальные результаты. Найдены и сравнены с литературными данными величины расщепления энергетического состояния экситона в зависимости от энергии излучаемых фотонов.

Ключевые слова: кремний, диоксид кремния, нанокристалл, квантовая точка, ионная имплантация, фотолюминесценция, температурная зависимость, четырехуровневая схема электронных переходов.

Введение

Нанокристаллический кремний (nc-Si), обладая лучшими люминесцентными свойствами по сравнению с массивным кремнием, является перспективным материалом для применения в опто- и наноэлектронных устройствах [1]. Несмотря на то, что исследования механизмов люминесценции nc-Si интенсивно ведутся более 20 лет, до сих пор со времени открытия интенсивной фотолюминесценции (ФЛ) пористого кремния [2] механизмы ФЛ служат предметом дискуссий. Одним из способов изучения природы ФЛ является анализ ее температурной зависимости в интервале температур от гелиевых до комнатной [3].

В работе [4] анализ температурной зависимости выполнен с использованием механизма ФЛ, основанного на модели [5], в которой предполагают, что экситоны

в возбужденных нанокристаллах (НК) кремния локализованы на димерах Si-Si, расположенных на поверхности НК. Однако эта модель была просчитана в работе [5] для НК малых размеров (менее 2 нм), и ее применение для систем типа SiO₂: nc-Si, в которых средний размер НК существенно выше, проблематично. В соответствии с моделью, предложенной в работе [6], температурная зависимость интенсивности ФЛ кремния обусловлена обменным расщеплением энергетического состояния экситона, пространственно ограниченного в объеме квантовой точки (КТ), на триплетный и синглетный уровни. При этом, вообще говоря, как синглетное, так и триплетное состояния являются оптически активными. Однако имеющий большую энергию синглет обладает на 2—3 порядка меньшим излучательным временем жизни, чем нижележащий триплет. (По-

этому иногда эти экситонные состояния называют «ярким» и «темным» соответственно.) Заселенность синглетного уровня за счет термической активации увеличивается с ростом температуры, что обуславливает температурную зависимость интенсивности ФЛ. Обменное расщепление экситона растет с уменьшением размера НК [6]. Другим следствием размерного ограничения является увеличение ширины оптической щели НК кремния по сравнению с объемным материалом на величину, равную энергии квантового ограничения [7, 8]. Так как расщепление мало по сравнению с оптической щелью НК и энергиями излучаемых фотонов, то это дает возможность приписать каждую монохроматическую составляющую ФЛ излучению совокупности НК определенного размера и использовать анализ температурной зависимости монохроматических составляющих для определения параметров модели. Модель [6] дает согласующийся с экспериментом ход температурной зависимости интенсивности ФЛ пористого кремния в области достаточно низких температур, но не предсказывает экспериментально наблюдающегося для системы SiO_2 : nc-Si снижения интенсивности при более высоких температурах. В работе [9] данная модель была дополнена учетом безызлучательной рекомбинации, что позволило объяснить немонотонный ход температурной зависимости интенсивности ФЛ для системы SiO_2 : nc-Si, полученной путем ионной имплантации Si в SiO_2 . Однако выражение, приведенное в работе [9], предсказывает стремление интенсивности ФЛ к нулевому значению при $T \rightarrow 0$, что не соответствует эксперименту (см. ниже). В работе [10] температурная зависимость интенсивности ФЛ описывается выражением, которое также дает полное гашение ФЛ при $T = 0$. Следовательно, это выражение тоже неадекватно при низких температурах.

Ниже для описания температурной зависимости ФЛ НК кремния предложена новая (четырёхуровневая) энергетическая схема, и расчеты в соответствии с этой схемой применены для обработки собственных экспериментальных данных по спектрам ФЛ ионно-синтезированной системы SiO_2 : nc-Si.

Методика эксперимента

В качестве исходного материала была использована пленка SiO_2 толщиной ~580 нм, полученная методом термического окисления кремния. С целью синтеза НК кремния проводили имплантацию ионов Si^+ с энергией 100 кэВ при дозах $5 \cdot 10^{16}$ и $3 \cdot 10^{17}$ см^{-2} . Постимплантационный отжиг осуществляли в потоке N_2 при температуре 1100 °С в течение 2 ч. Согласно многочисленным литературным данным [1] и результатам, полученным авторами ранее [11], выбранные режимы обеспечивают формирование в пленках SiO_2 массивов НК кремния, излучающих свет с длинами волн 650—1000 нм. Данные электронной микроско-

пии, представленные в научно-технической литературе (см., например, работу [12]) для образцов, полученных в близких режимах, свидетельствуют о том, что средний размер НК кремния возрастает при увеличении дозы (от значений ~ 3 нм для дозы $\text{Si}^+ 5 \cdot 10^{16}$ см^{-2} до 12 нм для дозы $3 \cdot 10^{17}$ см^{-2}).

Измерения ФЛ проводили в диапазоне длин волн 600—1000 нм при температуре от 10 до 310 К, для чего образцы помещали в оптический криостат с гелиевым рефрижератором замкнутого цикла Advanced Research Systems DE-202. В качестве источника возбуждения применяли непрерывный лазер Nd : YAG, излучающий на длине волны 532 нм. Регистрацию ФЛ осуществляли с использованием монохроматора Acton Research 2300i и CCD-камеры Spec-10:256E (матрица 1024 × 256, 200—1050 нм). Форму спектров ФЛ корректировали с учетом спектральной зависимости чувствительности оптической схемы.

Результаты и их обсуждение

На рис. 1, а (см. третью стр. обложки) приведены спектры ФЛ образца SiO_2 с НК Si, синтезированной при дозе $\text{Si}^+ 5 \cdot 10^{16}$ см^{-2} , измеренные при различных температурах. Увеличение дозы ионов Si^+ до $3 \cdot 10^{17}$ см^{-2} привело к ослаблению ФЛ и сдвигу положения максимума в сторону больших длин волн (данные не приведены). Используя эти результаты, были найдены зависимости от температуры интенсивности монохроматических составляющих ФЛ. На рис. 1, б (см. третью стр. обложки) показано несколько таких зависимостей, построенных на основании данных, представленных на рис. 1, а (см. третью стр. обложки).

Для интерпретации температурных зависимостей интенсивности ФЛ рассмотрим следующую энергетическую схему. Будем считать, что энергия фотона зависит от размера НК только вследствие эффекта размерного квантования [7, 8]. При описании схемы излучательных и безызлучательных переходов в НК кремния вместо «экситонного» удобно использовать для наглядности «одноэлектронный» язык, что не влияет на адекватность расчетов. Схема энергетических переходов электрона показана на рис. 2. Введение в модель четвертого уровня (см. рис. 2) позволяет учесть возможность безызлучательных переходов в НК. Возбуждение под действием лазерного излучения соответствует переходу электрона 1 → 2 с вероятностью A_{12} (этот переход в случае нерезонансного возбуждения является двухступенчатым, т. е. происходит путем заброса электрона на некоторый высоколежащий уровень, отстоящий от уровня 1 на величину энергии возбуждающего фотона, с последующим быстрым безызлучательным переходом на уровень 2). Переходы 2 → 3, 3 → 2 и 2 → 4 будем предполагать совершающимися с помощью фононов и припишем им вероятности α_{23} , β_{32} и α_{24} соответственно. Пере-

ходы $2 \rightarrow 1$ и $3 \rightarrow 1$ считаем излучательными, происходящими с вероятностями B_{21} и B_{31} , а переход $4 \rightarrow 1$ — безызлучательным, с вероятностью C_{41} . Для простоты не учитываем переход $3 \rightarrow 4$, поскольку его роль аналогична роли перехода $2 \rightarrow 4$, и ничего принципиально нового его учет не дает. Данная схема описывает ФЛ совокупности НК одинакового размера (формально она применима и к одному НК). Расчет интенсивности ФЛ всего ансамбля, вообще говоря, должен учитывать обмен возбужденными носителями между НК, что является более сложной задачей.

Обозначим через N_λ число НК определенного размера, потенциально способных излучать фотоны с данной длиной волны λ . Согласно квантово-размерному механизму ФЛ НК, каждому интервалу λ соответствует свой интервал размеров НК. Предположим, что под действием возбуждающего излучения в каждом НК может образоваться не более одного экситона, т. е. возбуждение не слишком сильное. Пусть N_1 — число НК, в которых не возникло возбуждения. (В отсутствие лазерного возбуждения $N_1 = N_\lambda$.) В рамках предлагаемой модели, как несложно показать, заселенность N_1 уровня 1 определяется отношением вероятностей возбуждения и возврата НК в основное состояние. Уровень 2 заселяется при любой температуре, а уровень 3 при низких температурах ($kT < E_{23}$) мало заселен, и возврат электронов на уровень 1 при таких температурах почти полностью определяется переходами с триплетного уровня 2, характеризующегося большим по сравнению с уровнем 3 временем жизни. С ростом температуры заселенность синглетного уровня 3 увеличивается за счет термического возбуждения (переход $2 \rightarrow 3$). Это приводит к быстрому переходу электрона на уровень 1, в результате чего его заселенность возрастает. Вместе с тем возрастает вероятность термического заброса электрона с уровня 2 на уровень 4 и, как следствие, увеличивается

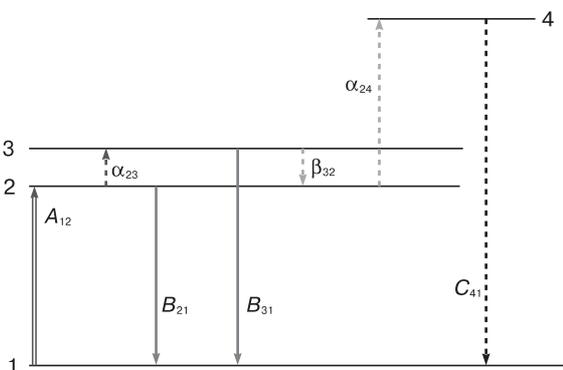


Рис. 2. Схема четырехуровневой модели: 1 — основной электронный уровень, соответствующий энергии невозбужденного состояния электрона в валентной зоне; 2, 3 — возбужденные уровни, отвечающие триплетному и синглетному состояниям экситона соответственно; 4 — дополнительный уровень, связанный, например, с поверхностными ловушками НК. (В общем случае уровень 4 может располагаться как выше, так и ниже уровней 2 и 3.)

число актов (в единицу времени) безызлучательного перехода $4 \rightarrow 1$.

Система кинетических уравнений, соответствующая представленной на рис. 2 схеме, имеет следующий вид:

$$\dot{N}_2 = A_{12}N_1 - \alpha_{23}N_2 - B_{21}N_2 + \beta_{32}N_3 - \alpha_{24}N_2; \quad (1)$$

$$\dot{N}_3 = \alpha_{23}N_2 - B_{31}N_3 - \beta_{32}N_3; \quad (2)$$

$$\dot{N}_4 = \alpha_{24}N_2 - C_{41}N_4. \quad (3)$$

Здесь N_2 , N_3 и N_4 — суммарное число электронов на соответствующих уровнях (2, 3, 4) во всем массиве НК. Поскольку в этой модели не предполагается наличие обмена экситонами между НК, в каждом НК, где произошло возбуждение, имеется один участвующий в переходах электрон, который находится на одном из указанных уровней. Систему (1)—(3) необходимо дополнить уравнением постоянства полного числа электронов, которое выражает также условие электронейтральности НК:

$$N_\lambda = N_1 + N_2 + N_3 + N_4. \quad (4)$$

Выражение для интенсивности монохроматической составляющей ФЛ, нормированной на энергию излучаемого фотона, можно записать как

$$I_{PL} = B_{21}N_2 + B_{31}N_3. \quad (5)$$

Первое слагаемое соответствует триплетной (не-термоактивированной) ФЛ, а второе — синглетной (термоактивированной) ФЛ. Зависящие от температуры коэффициенты в системе (1)—(3) определяют вероятности поглощения или испускания фотона и имеют на основе распределения Бозе—Эйнштейна для экситонов следующий вид:

$$\alpha_{23} = p_{23} \left(\exp \frac{E_{23}}{kT} - 1 \right)^{-1}; \quad (6)$$

$$\alpha_{24} = p_{24} \left(\exp \frac{E_{24}}{kT} - 1 \right)^{-1}; \quad (7)$$

$$\beta_{32} = p_{23} \left[\left(\exp \frac{E_{23}}{kT} - 1 \right)^{-1} + 1 \right]. \quad (8)$$

Здесь E_{23} и E_{24} — энергии активации излучательного и безызлучательного переходов $3 \rightarrow 1$ и $4 \rightarrow 1$ соответственно; p_{23} , p_{24} — коэффициенты, не зависящие от температуры.

Решая в стационарном случае систему уравнений (1)—(5) с учетом соотношений (6)—(8), получаем следующее выражение для температурной зависимости I_{PL} :

$$I_{PL}(T) = \left[A \left(\exp \frac{E_{23}}{kT} - 1 \right)^{-1} + B \right] L^{-1},$$

$$L = C \left(\exp \frac{E_{23}}{kT} - 1 \right)^{-1} + D \left(\exp \frac{E_{24}}{kT} - 1 \right)^{-1} + F \left(\exp \frac{E_{23}}{kT} - 1 \right)^{-1} \left(\exp \frac{E_{24}}{kT} - 1 \right)^{-1} + 1. \quad (9)$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$A = B \frac{p_{23}(B_{21} + B_{31})}{B_{21}(p_{23} + B_{31})}; \quad B = \frac{B_{21}A_{12}N_{\lambda}}{(B_{21} + A_{12})};$$

$$C = \frac{p_{23}(B_{21} + B_{31} + 2A_{12})}{(p_{23} + B_{31})(B_{21} + A_{12})};$$

$$D = \frac{p_{24}(C_{41} + A_{12})}{C_{41}(B_{21} + A_{12})}; \quad F = D \frac{p_{23}}{(p_{23} + B_{31})}.$$

Коэффициенты A, B, C, D и F не зависят от температуры.

При $E_{23} = 0$ и $B_{21} = B_{31}$ выражение (9) переходит в формулу, аналогичную формуле Мотта [13]:

$$I_{PL}(T) = \frac{I_{0M}}{A_M \exp\left(-\frac{E_T}{kT}\right) + 1}. \quad (10)$$

Это соотношение описывает ФЛ в массивных аморфных материалах, а также определяет зависимость квантового выхода люминесценции от температуры при внешнем тушении. (Для сравнения выражений (9) и (10) следует в уравнении (10) положить: $E_T = E_{24}$, $I_{0M} = A/C$, $A_M = F/C$.) Таким образом, введение четвертого уровня в схеме, приведенной на рис. 2, фактически является «традиционным» подходом, объясняющим затухание люминесценции с ростом температуры. Главной особенностью схемы для НК по сравнению с известными схемами для массивных образцов является наличие третьего уровня, заполнение которого обеспечивает появление участка роста интенсивности ФЛ с увеличением температуры.

При $B = 0$, $kT \gg E_{23}$ и $D = F/C$ формула (9) переходит в формулу, приведенную в работе [9]:

$$I_{PL}(T) = \frac{I_{0W}}{\left[1 + A_W \exp\left(\frac{E_r}{kT}\right) \right] \left[1 + B_W \exp\left(-\frac{E_{nr}}{kT}\right) \right]}, \quad (11)$$

где $I_{0W} = A/C$; $A_W = 1/C$; $B_W = F/C$; $E_r \equiv E_{23}$; $E_{nr} \equiv E_{24}$. Условие $B = 0$ выполняется при $B_{21} = 0$, что соответствует исключению триплетной составляющей ФЛ. Из соотношения (11) следует, что при $T \rightarrow 0$ интенсивность ФЛ стремится к нулю. Это не соответствует полученным авторами экспериментальным данным (см. рис. 1, б (третья стр. обложки)). Следовательно, выражение (11) неадекватно при слишком низких температурах, когда триплетная составляющая вносит значительный вклад в ФЛ (как это отмечалось в работе [6]).

Путем аппроксимации экспериментальных данных выражением (9) по спектрам ФЛ, измеренным при различных температурах, можно определить значения входящих в уравнения коэффициентов и энергий переходов. На рис. 3 в качестве примера показана аппроксимация полученной для образца, имплантированного ионами Si^+ с дозой $5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$, температурной зависимости интенсивности ФЛ при $\lambda = 750 \text{ нм}$. Характерной особенностью является немонотонный ход температурной зависимости. Это связано с возрастанием при высоких температурах вероятности перехода $2 \rightarrow 4$ с последующим безызлучательным переходом $4 \rightarrow 1$, что приводит к снижению вклада излучательных переходов.

Зависимость значений E_{23} от энергии фотона для образцов, имплантированных ионами кремния с дозами $5 \cdot 10^{16}$ и $3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$, представлена на рис. 4. С увеличением энергии фотона, а значит, с уменьшением размера НК, величина E_{23} монотонно возрастает, что характерно для зависимости величины обменного расщепления энергии экситона от разме-

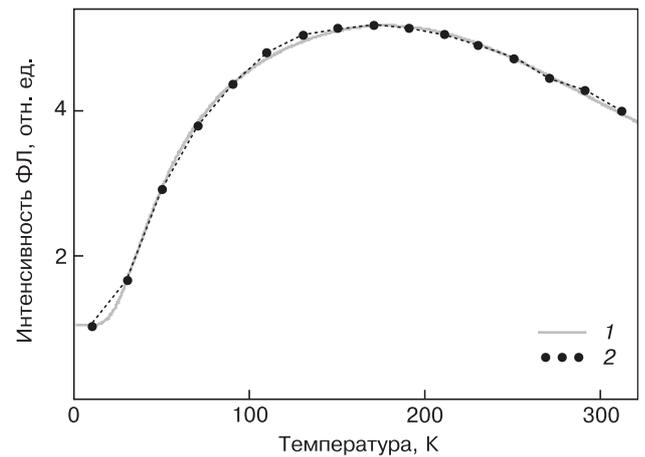


Рис. 3. Аппроксимация экспериментальной температурной зависимости монохроматической составляющей (750 нм) ФЛ формулой (9) для дозы ионов $Si^+ 5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$: 1 — расчет; 2 — эксперимент

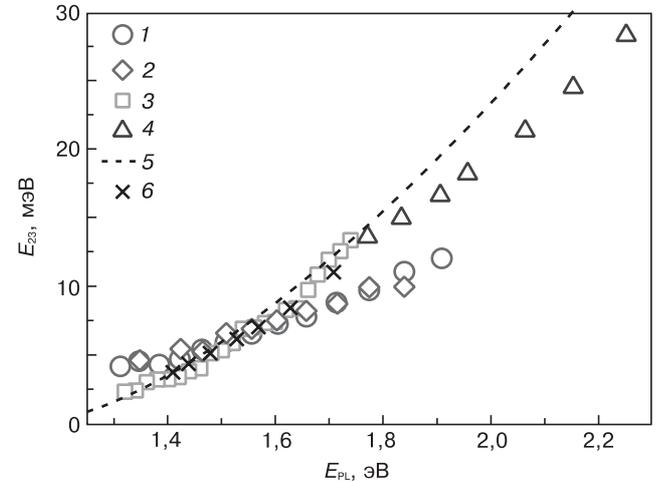


Рис. 4. Зависимости энергии расщепления E_{23} от энергии излучаемого фотона E_{pl} (1, 2), в сравнении с данными из работ [9], [6], [4] (3–5) и теоретической зависимостью (6) из работы [6]: 1 — $5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2} Si^+$; 2 — $3 \cdot 10^{17}$

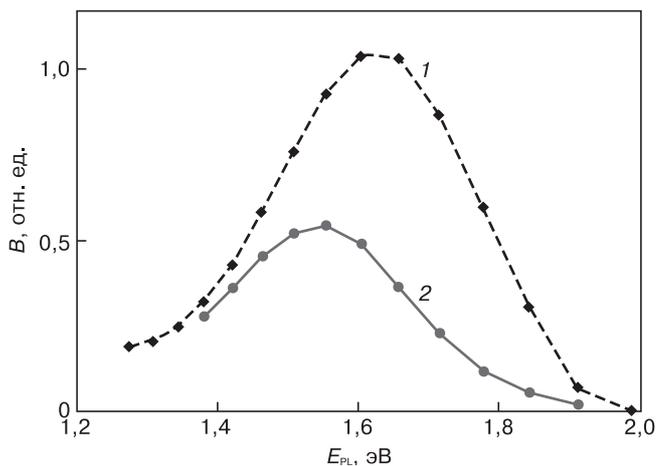


Рис. 5. Зависимости коэффициента V от энергии излучаемого фотона E_{PL} , полученные путем аппроксимации экспериментальных данных расчетными зависимостями при $T = 10$ К, для образцов, имплантированных ионами Si^+ с дозами $5 \cdot 10^{16}$ (1) и $3 \cdot 10^{17}$ cm^{-2} (2)

ра КТ Si [6] и свидетельствует в пользу квантово-размерного механизма ФЛ. На рис. 4 для сравнения также приведены данные работ [4, 6, 9] и теоретическая кривая, построенная по данным работы [6]. Близость полученных значений расщепления экситона с литературными данными наблюдается в интервале энергий фотонов $E_{PL} = 1,45 \pm 1,65$ эВ. Наибольшее расхождение имеется при малых и больших энергиях квантов E_{PL} . Расхождение не удивительно, так как функции $E_{23}(E_{PL})$, полученные путем обработки экспериментальных данных, зависят от используемых при обработке моделей. Что касается теоретической кривой [6], следует учитывать, что она получена при определенных предположениях относительно зависимостей энергий расщепления и энергии кванта от диаметра НК. Эти зависимости не являются строго доказанными. В частности, вторая из этих зависимостей различается по данным разных работ [7, 8].

При $T \rightarrow 0$ формула (9) дает $I_{PL} = V$. Следовательно, коэффициент V имеет смысл интенсивности ФЛ вблизи абсолютного нуля, когда ФЛ имеет чисто «триплетный» (нетермоактивационный) характер. Зависимость V от энергии излучаемого фотона E_{PL} — это спектр ФЛ вблизи абсолютного нуля. Поскольку V пропорционален N_{λ} , функция $V(E_{PL})$ соответствует распределению светоизлучающих НК по размерам. На рис. 5 приведены зависимости коэффициента V от энергии фотона для образцов, имплантированных ионами Si^+ с дозами $5 \cdot 10^{16}$ и $3 \cdot 10^{17}$ cm^{-2} соответственно. Из рис. 5 видно, что максимум функции $V(E_{PL})$ при меньшей дозе сдвинут в область больших энергий фотонов, т. е. соответствует большей величине оптической щели. Так как ширина оптической щели в соответствии с квантово-размерным механизмом растет с уменьшением размера НК [7, 8], из данных, представленных на рис. 5, можно сделать вывод, что с увеличением дозы (концентрации избыточного кремния) средний размер НК возрастает. Это обусловлено процессом созревания по Оствальду при

больших степенях пересыщения твердого раствора $SiO_2 : Si$ [14, 15]. Снижение интенсивности ФЛ с ростом дозы тоже согласуется с квантово-размерным механизмом ФЛ [8].

Таким образом, предлагаемая модель правильно описывает температурную зависимость ФЛ как при низких, так и при высоких температурах. Это обусловлено тем, что в ней, во-первых, не пренебрегают вкладом в ФЛ триплетного уровня и, во-вторых, учитывают ослабление эмиссии света при высоких температурах благодаря наличию дополнительного (четвертого) уровня, вклад которого в безызлучательный канал рекомбинации растет с увеличением температуры.

Заключение

Предложена модель ФЛ нанокристаллов кремния, учитывающая активационную зависимость ФЛ от температуры, связанную с расщеплением энергетического уровня возбужденного экситона на триплетный и синглетный подуровни, переходы с которых на основной энергетический уровень являются излучательными. Введен в рассмотрение дополнительный (четвертый) уровень, возбуждаемый термически, переходы с которого на основной уровень предполагаются безызлучательными. Показано, что полученная на основе стационарного решения системы кинетических уравнений формула для температурной зависимости монохроматических составляющих ФЛ не противоречит известным литературным и полученным авторами работы экспериментальным данным. Модель допускает дальнейшее развитие: учет энергетического взаимодействия между соседними НК в массиве, кратной заселенности уровней при больших интенсивностях возбуждения, Оже-рекомбинации и т. д.

Библиографический список

1. Silicon nanocrystals: fundamentals, synthesis and applications / Ed. by L. Pavesi, R. Turan. — Weinheim: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2010. — 613 p.
2. Canham, L. T. Silicon quantum wire array fabrication by electrochemical and chemical dissolution of wafers / L. T. Canham // Appl. Phys. Lett. — 1990. — V. 57, N 10. — P.1046—1048.
3. Heitmann, J. Excitons in Si nanocrystals: confinement and migration effects / J. Heitmann, F. Muller, L. Yi, M. Zacharias, D. Kovalev, F. Eichhorn // Phys. Rev. B. — 2004. — V. 69. — P. 195309.
4. Kobitski, A. Yu. Self-trapped exciton recombination in silicon nanocrystals / A. Yu. Kobitski, K. S. Zhuravlev, H. P. Wagner, D. R. T. Zahn // Ibid. — 2001. — V. 63. — P. 115423.
5. Allan, G. Nature of luminescent surface states of semiconductor nanocrystallites / G. Allan, C. Delerue, M. Lannoo // Phys. Rev. Lett. — 1996. — V. 76, N 16. — P. 2961—2964.
6. Calcott, P. D. J. Identification of radiative transitions in highly porous silicon / P. D. J. Calcott, K. J. Nash, L. T. Canham, M. J. Kane, D. Brumhead // J. Phys. Condens. Matter. — 1993. — V. 5. — P. L91—L98.
7. Бурдов, В. А. Зависимость ширины оптической щели кремниевых квантовых точек от их размера / В. А. Бурдов // ФТП. — 2002. — Т. 36, № 10. — С. 1233—1236.
8. Delerue, C. Theoretical aspects of the luminescence of porous silicon / C. Delerue, G. Allan, M. Lannoo // Phys. Rev. B. — 1993. — V. 48, N 15. — P. 11024—11036.
9. Wang, J. Thermal activation energy of crystal and amorphous nano-silicon in SiO_2 matrix / J. Wang, M. Righini, A. Gnoli,

S. Foss, T. Finstad, U. Serincan, R. Turan // *Solid State Communications*. – 2008. – V. 147. – P. 461–464.

10. Kapoor, M. Origin of the anomalous temperature dependence of luminescence in semiconductor nanocrystallites / M. Kapoor, V. A. Singh, G. K. Johri // *Phys. Rev. B*. – 2005. – V. 72. – P. 195313

11. Tetelbaum, D. I. Influence of the nature of oxide matrix on the photoluminescence spectrum of ion-synthesized silicon nanostructures / D. I. Tetelbaum, O. N. Gorshkov, A. V. Ershov, A. P. Kasatkin, V. A. Kamin, A. N. Mikhaylov, A. I. Belov, D. M. Gaponova, L. Pavesi, L. Ferraioli, T. G. Finstad, S. Foss // *Thin Solid Films*. – 2006. – V. 515, N.1–2. – C. 333–337.

12. Wang, Y. Q. The effect of implantation dose on the microstructure of silicon nanocrystals in SiO₂ / Y. Q. Wang, R. Smirani, G. G. Ross // *Nanotechnology*. – 2004. – V. 15. – P. 1554–1560.

13. Mott, N. F. Silicon dioxide and the chalcogenide semiconductors; similarities and differences / N. F. Mott // *Adv. Phys.* – 1977. – V. 26, N 4. – C. 363–391.

14. Fernandez, B. G. Influence of average size and interface passivation on the spectral emission of Si nanocrystals embedded in SiO₂ / B. G. Fernandez, M. Lopez, C. Garcia, A. Perez-Rodriguez, J. R. Morante, C. Bonafos, M. Carrada, A. Claverie // *J. Appl. Phys.* – 2002. – V. 91, N 2. – P. 798–807.

15. Тетельбаум, Д. И. О влиянии процесса коалесценции и характера исходного оксида на фотолюминесценцию ионно-синтезированных нанокристаллов Si в SiO₂ / Д. И. Тетельбаум, О. Н. Горшков, А. П. Касаткин, А. Н. Михайлов, А. И. Белов, Д. М. Гапонова, С. В. Морозов // *ФТТ*. – 2005. – Т. 47, № 1. – С. 17–21.

Исследование выполнено при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России») и РФФИ (10–02–00995, 12–02–00980).

CONTENTS AND ABSTRACTS

Y. Y. Hervieu, *Tomsk State University*

Kinetics of Dopant Accumulation in the Adsorption Layer During Molecular-Beam Epitaxy 4

A kinetic model of the doping processes in molecular beam epitaxy is developed. The dopant incorporation into the growing crystal is assumed to occur via both blocking dopant atoms at the kink positions by the host atoms and atomic exchange between dopant adatoms and atoms of the topmost crystalline layer. The dopant surface segregation is treated as accumulation of dopant atoms in energetically favorable adsorption positions on the surface. Two segregation pathways are considered: climbing of dopant adatoms over moving steps and jumping of the dopants out of the topmost crystalline layer. It is shown that increasing supersaturation in the adlayer, e.g. with decreasing temperature or increasing growth rate, leads to more efficient blocking of the dopant atoms and, as a consequence, to the decreasing surface segregation. The supersaturation is partially reduced with appearance of 2D islands on the terraces and creation of kinks at the 2D island edges. This results in weaker growth rate and temperature dependences of the surface segregation ratio. Very strong (superexponential) dependence of the surface segregation ratio on the growth temperature is possible under the condition of the intensive jumping of the dopants out of the topmost crystalline layer. The reason is that the probability of «immurement» of the dopant atoms by the moving step depends exponentially on the jumping-out rate constant. The model reproduces experimentally observed segregation behavior of Sb on Si(100).

Key words: epitaxy, molecular beam, doping, surface segregation, steps, kinks, islands.

MATERIALS SCIENCE AND TECHNOLOGY. DIELECTRICS

V. E. Rogalin, *FSUE «NPO Astrophysics»*

Transparent Materials for High-Power Pulsed CO₂-Lasers 11

In one experiment, having the aperture of the beam, comparable with dimensions of the sample, we compared the real optical damage of the main transparent materials for CO₂-lasers: BaF₂, NaCl, KCl, KBr, RbI, AgCl, CsI, KPC-5, KPC-6, ZnSe, ZnS, GaAs и Ge.

Experimentally and theoretically we compared the nonlinear losses in 13 crystals, when the radiation in the range of 10⁷–4 · 10⁸ W/cm² passed through them. The «tail» of the impulse was practically completely absorbed by plasma of optical breakdown

of air in TEA CO₂-laser, but the «peak» — only partially — by «hot» disbalanced charge carriers in the crystal. The losses of laser radiation exponentially depend on band gap of material.

The peculiarities of damage Ge single crystals by high power pulsed CO₂-laser were investigated. For the first time windows from Ge (diameter — 420 mm) were elaborated, produced and tested. We looked into, how parameters of crystal lattice, admixtures and structure of point defects, which can be changed by influence X-ray irradiation and annealing, can influence on the process of laser volume pores generation in alkali halides. We revealed dependence of pore dimensions from influence conditions, parameters of high-power laser beam, energy of crystal lattice. We studied kinetics of thermal annealing for to diminish dimensions of this pores.

Keywords: TEA CO₂-lasers, window, optical damage, Ge, GaAs, ZnSe, KPC-5, KPC-6, NaCl, KCl, BaF₂, single crystals, alkali halides, plasma generation, impurity centers, optical breakdown, absorbing micro inhomogeneous, micro damage, pores.

E. I. Pozdnyakov, V. A. Vorobyev, O. Ya. Manashirov*, *North-Caucasian Federal University, *LTD SPC «LUM»*

Synthesis and Study of the Infrared Luminescence of Solid Solutions (Y_{1-x}Yb_x)₃Al₅O₁₂ with Laser Excitation..... 19

This research work is dedicated to research and development of luminescent properties of solid solutions (Y_{1-x}Yb_x)₃Al₅O₁₂ with laser excitation.

The spectra of infrared luminescence excited by a laser beam with a wavelength of 0.94 microns. The analysis of the luminescence spectra obtained for solid solutions with different concentrations of ytterbium ions in the composition, and the dependences of the luminescence intensity of the activator composition. Found that in the concentration range of ytterbium ions in the (0.03 ≤ x ≤ 0.09), there is a significant increase in the intensity of the luminescence in the 1036 nm and reaches a maximum. With further increase in the concentration of ytterbium ions in the range (0.09 ≤ x ≤ 0.115), a decrease in the intensity of luminescence. Decrease in the intensity of luminescence caused by the action of migration and multipole interactions between the ions of ytterbium. And this is due to the fact that at higher concentrations, the probability of recombination energy between ytterbium ions and various quenching centers.

Change in the concentration of ytterbium ions has also a strong influence on the kinetic characteristics of the infrared luminescence of solid solutions (Y_{1-x}Yb_x)₃Al₅O₁₂.