

## Образование гексагональной фазы кремния 9R-Si при имплантации системы SiO<sub>2</sub>/Si ионами K<sup>+</sup>

А.А. Никольская,<sup>1,\*</sup> Д.С. Королев,<sup>1</sup> А.Н. Михайлов,<sup>1</sup> А.А. Конаков,<sup>1</sup> А.И. Охалкин,<sup>2</sup>  
С.А. Краев,<sup>2</sup> А.И. Андрианов,<sup>1</sup> А.Д. Моисеев,<sup>1</sup> А.А. Сушков,<sup>1</sup> Д.А. Павлов,<sup>1</sup> Д.И. Тетельбаум<sup>1,†</sup>

<sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Научно-исследовательский физико-технический институт  
Россия, 603022, Нижний Новгород, пр. Гагарина, д. 23, стр. 3

<sup>2</sup>Институт физики микроструктур РАН. Россия, 603095, Нижний Новгород, ГСП-105  
(Поступила в редакцию 17.03.2023; после доработки 27.04.2023; принята к публикации 03.05.2023)

Гексагональные полиморфы кремния привлекают большое внимание научного сообщества в связи с их потенциальным использованием в электронике и фотонике нового поколения. Однако получение стабильных гетероструктур на основе кубического и гексагональных полиморфов является сложной задачей. В настоящей работе показана возможность синтеза тонких слоев гексагональной фазы кремния 9R-Si с помощью традиционного метода микроэлектроники — ионной имплантации. Имплантация ионов K<sup>+</sup> производилась через слой SiO<sub>2</sub>, толщина которого приблизительно вдвое превышала проецированный пробег K<sup>+</sup>, с последующим высокотемпературным отжигом. Методом высокоразрешающей просвечивающей электронной микроскопии показано, что при имплантации в подложке Si на границе с пленкой SiO<sub>2</sub> образуется тонкий аморфный слой, в процессе рекристаллизации которого при отжиге происходит образование полиморфа 9R-Si. Предполагается, что при имплантации через оксидный слой создаются механические напряжения, способствующие гексагонализации при последующем высокотемпературном отжиге. Установлена зависимость эффективности гексагонализации от ориентации подложки. Помимо образования фазы 9R-Si, при используемых параметрах имплантации и отжига в кремнии образуются светоизлучающие дефекты, фотолюминесценция которых на длине волны ~1240 нм наблюдается вплоть до температуры ~120 К. Полученные результаты могут найти применение в кремниевой микро-, нано-, оптоэлектронике.

PACS: 61.82.fk. УДК: 538.9

Ключевые слова: кремний, структура SiO<sub>2</sub>/Si, ионная имплантация, гексагональные полиморфы кремния, фаза 9R-Si, фотолюминесценция.

DOI: [10.55959/MSU0579-9392.78.2330501](https://doi.org/10.55959/MSU0579-9392.78.2330501)

### ВВЕДЕНИЕ

Кремний является традиционным материалом современной электроники, уникальные свойства которого делают его незаменимым материалом в промышленном масштабе. Обычный кремний (c-Si) обладает структурой алмаза. Однако, под действием экстремальных условий могут возникать его различные метастабильные полиморфы [1, 2]. Полиморфизм кремния во многих случаях возникает в результате изменения порядка чередования плотноупакованных атомных слоев, что приводит к изменению периодичности в направлении, перпендикулярном этим слоям [2].

Полиморфизм позволяет варьировать физические свойства кремния. В частности, для гексагональных полиморфов кремния выполнены исследования электронных [3], оптических [4, 5] и механических свойств [6], открывающие перспективы использования кремния в устройствах электроники, фотоники и фотовольтаики нового поколения.

Поскольку гексагональные полиморфы кремния являются метастабильными, они могут спонтанно переходить в c-Si [7, 8]. Поэтому получение долгоживущих при нормальных условиях полиморфов является достаточно сложной задачей.

Ранее нами было обнаружено [9, 10], что формирование гексагонального кремния — фазы 9R-Si происходит при облучении кремния через достаточно толстую пленку SiO<sub>2</sub> тяжелыми ионами (K<sup>+</sup>, Ga<sup>+</sup>) с последующим отжигом при 800°C. Включения данной фазы были обнаружены в тонком слое Si, прилегающем к границе с пленкой SiO<sub>2</sub>, методом высокоразрешающей просвечивающей электронной микроскопии (ВРПЭМ). Кроме того, для полученных таким способом структур была обнаружена линия фотолюминесценции (ФЛ) при ~1240 нм. Предполагалось, что образование фазы 9R-Si обусловлено механическими напряжениями, релаксация которых во время отжига приводит к фазовому превращению. Образование различных гексагональных фаз в результате механических напряжений наблюдалось и в работах других исследователей [1], например, при высоких давлениях [11], синтезе нанопроволок [12] и эпитаксиальном росте [13]. Преимущество ионной имплантации при синтезе

\* E-mail: [nikolskaya@nifti.unn.ru](mailto:nikolskaya@nifti.unn.ru)

† E-mail: [tetelbaum@phys.unn.ru](mailto:tetelbaum@phys.unn.ru)

кремниевых политипов состоит в том, что этот метод хорошо совместим с технологией микроэлектроники, а также позволяет легко модифицировать условия обработки и топологию приборов.

Формирование гексагональных политипов кремния (2H и 9R) при ионной имплантации наблюдалось в процессе твердофазной эпитаксии аморфизованного ионным облучением слоя и изучалось в ряде работ (см., например, [14]), но при условиях, отличающихся от использованных нами. При этом интерпретация данного явления была неоднозначной, а о наличии ФЛ в этих работах не сообщается. Между тем, сочетание в одной и той же структуре на основе кремния включений гексагональных фаз и термоустойчивой ФЛ представляет несомненный практический интерес и заслуживает детальных исследований.

Исследования, выполненные в настоящей работе, позволили установить, что при облучении системы SiO<sub>2</sub>/Si в условиях, при которых после отжига наблюдаются включения 9R-Si фазы, происходит формирование прилегающего к границе раздела Si и SiO<sub>2</sub> аморфного слоя, рекристаллизация которого в присутствии механических напряжений приводит к образованию указанной фазы. Показана зависимость эффективности и особенностей формирования данной фазы от ориентации поверхности Si — (100), (112) и (111). Кратко обсуждается природа фотолуминесценции (ФЛ) в данных структурах. В отличие от [10], сделан вывод о том, что за наблюдаемую ФЛ ответственны светоизлучающие комплексы дефектов, образующиеся в процессе имплантации.

## 1. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

В качестве исходных использовались образцы *n*-Si (КЭФ-4.5 и КЭФ-20) с ориентациями поверхности (100) и (112), соответственно, и *p*-Si (КДБ-1) с номинальной ориентацией (111) (для этого образца методом ПЭМ было установлено, что плоскости (111) несколько разориентированы относительно поверхности на угол 4°). На этих образцах методом термического окисления при температуре 1100°C была выращена пленка SiO<sub>2</sub>, толщина которой по данным эллипсометрии составляла 120 нм. Структуры SiO<sub>2</sub>/Si подверглись облучению при комнатной температуре ионами K<sup>+</sup> с энергией 80 кэВ, дозой  $5 \times 10^{16} \text{ см}^{-2}$  при плотности ионного тока 3 мкА/см<sup>2</sup> на имплантере ИЛУ-200. Постимплантационный отжиг проводился в трубчатой печи в потоке осушенного азота при 800°C в течение 30 мин.

Структура образцов изучалась методом ВРПЭМ и сканирующей ПЭМ в светлом поле (СПЭМ) на микроскопе JEM-2100F. Поперечные срезы (110) образцов были подготовлены на установке Gatan 601.07000 TEM Specimen Preparation Kit с использованием технологии Gatan (USA). Обработка изображений проводилась с помощью программы

Gatan digital micrograph. Спектры ФЛ регистрировались при температуре жидкого азота при возбуждении полупроводниковым лазером с длиной волны 408 нм и мощностью 10 мВт с диаметром лазерного пучка ~2 мм.

## 2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Согласно расчетам по программе SRIM [15], при используемых параметрах облучения ионами K<sup>+</sup> средний проецированный пробег  $R_p$  и страглинг  $\Delta R_p$  составляют 50 нм и 15 нм, соответственно (рис. 1, *a*). При этом рассчитанные концентрации атомов K<sup>+</sup>, атомов отдачи Si и O в подложке непосредственно у границы с SiO<sub>2</sub> составляют  $\sim 5 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$  и  $\sim 5 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$ , соответственно, а номинальная концентрация вакансий  $V$ , а также собственных междоузельных атомов  $I$  (то есть концентрация без учета рекомбинации) равна  $\sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$  и спадает с глубиной (рис. 1). Поскольку концентрация выбитых из пленки атомов Si и O на границе раздела пленки и подложки на порядки больше концентрации атомов K<sup>+</sup>, следует, что основной вклад в концентрацию точечных дефектов в подложке Si вносят атомы отдачи. При таких концентрациях  $V$  и  $I$  должна происходить аморфизация кремния. Считается, что для аморфизации концентрация дефектов должна быть не менее чем 5–10% от концентрации атомов кремния в кристалле [16]. Исходя из этого, без учета рекомбинации можно было ожидать образование аморфного слоя Si толщиной ~40 нм.

Согласно данным ВРПЭМ (рис. 2, *a*), после облучения образца с ориентацией поверхности (100) в подложке Si на границе с пленкой SiO<sub>2</sub> действительно наблюдается образование слоя аморфного кремния (*a*-Si), причем его толщина составляет ~20 нм. Отличие рассчитанной (рис. 1, *b*) и фактической толщины аморфного слоя (рис. 2, *a*), по видимому, связано с частичной рекомбинацией  $V$  и  $I$  (не учитывающийся в программе SRIM), которая особенно выражена для случая облучения относительно легкими атомами отдачи Si и O.

На обзорном снимке, полученном методом СПЭМ, видно (рис. 2, *b*), что граница между аморфным слоем и кристаллической подложкой является неровной и содержит углубления («лунки»). Образование такого рельефа может соответствовать распределению треков имплантированных ионов K<sup>+</sup> (и каскадов смещения), доходящих до границы раздела аморфного слоя с кристаллическим. Наблюдается локальная рекристаллизация участков *a*-Si в окрестностях лунок, которая может быть связана с термическими пиками вдоль треков тяжелых ионов K<sup>+</sup>.

После отжига при 800°C, как видно на снимке ПЭМ (рис. 3), аморфный слой полностью рекристаллизовался. При этом внутри данного слоя наблюдаются дефекты упаковки, что типично для процесса твердофазной эпитаксии [14, 17]. На кар-

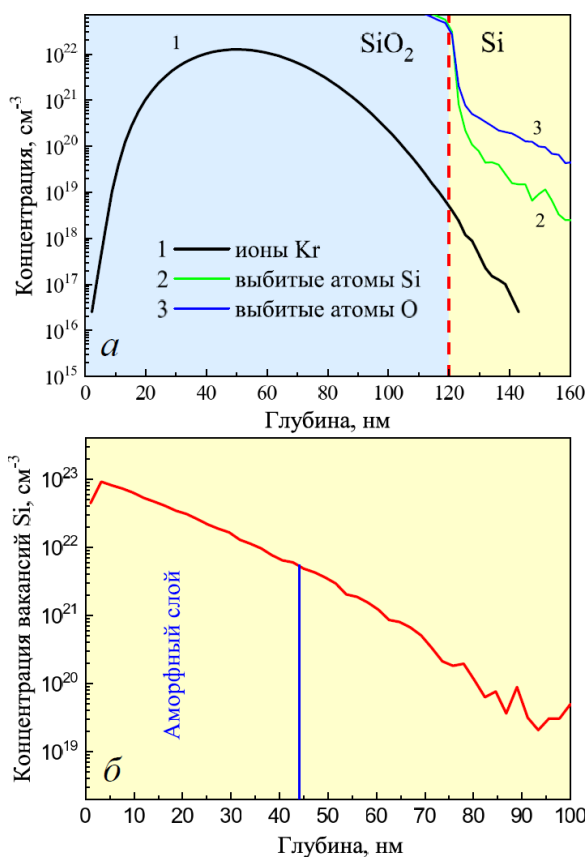


Рис. 1. Рассчитанные в программе SRIM профили распределения атомов Кг и атомов отдачи Si и O в системе SiO<sub>2</sub>/Si (а), а также номинальный профиль распределения вакансий кремния, образованных в подложке при облучении системы SiO<sub>2</sub>/Si (б). (Отсчет глубины на рис. 1, б — от границы раздела SiO<sub>2</sub> и Si)

тине, полученной путем Фурье преобразования от данного изображения, помимо рефлексов типичных для *c*-Si, наблюдаются по паре дополнительных слабых рефлексов, расположенных между рефлексами от семейства плоскостей Si (111) и отстоящих от центрального пятна на расстоянии 1/3 и 2/3. Такая картина указывает на образование включений гексагональной фазы 9R-Si [10, 18].

Для образцов кремния с ориентациями (112) и (111) наблюдается несколько иная картина. На рис. 4, а приведено изображение ВРПЭМ для образца с ориентацией поверхности (112), подвергнутого имплантации и отжигу. На изображении видны массивы («пачки») непосредственно примыкающих друг другу дефектов упаковки, которые формируют кристаллическую структуру гексагонального кремния фазы 9R-Si (рис. 4, в) [18]. При этом семейство плоскостей {111} материнской фазы *c*-Si, преобразованное в семейство {001} фазы 9R-Si, составляет значительно меньший угол с поверхностью, чем в случае образца с ориентацией (100). На картине дифракции (рис. 4, б) наблюдаются дополнительные (по отношению к дифракции от (111) *c*-Si) рефлексы, которые расшифровываются как брэгговские отражения от семейства плоскостей 9R-Si

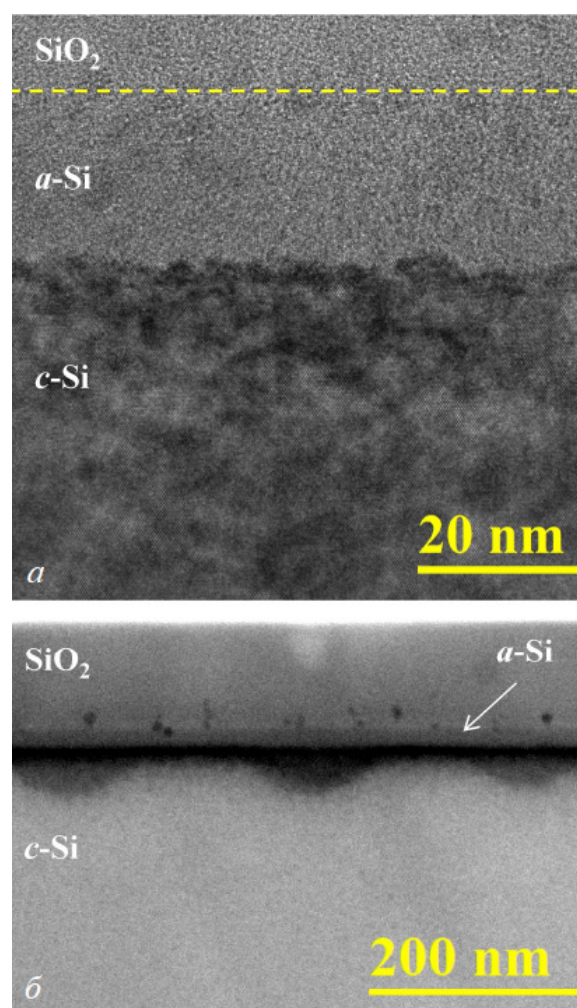


Рис. 2. Снимки ВРПЭМ (а) и СПЭМ (б) поперечного среза (110) образца SiO<sub>2</sub>/Si (100), облученного ионами Кг<sup>+</sup>

с индексами (003) и (006). В отличие от образца Si с ориентацией (100) слой фазы 9R-Si является практически непрерывным, что видно на приведенном снимке и дополнительно было проверено с помощью съемок с многочисленных участков среза. Толщина данного слоя составляет ~15 нм.

Картина ВРПЭМ и дифракция для образца с номинальной ориентацией поверхности (111), подвергнутого облучению и последующему отжигу, представлена на рис. 5. Как и для образца с ориентацией (112), в подложке на границе с пленкой наблюдается практически непрерывный слой фазы 9R-Si. Толщина этого слоя составляет ~10 нм. Наличие фазы 9R-Si было установлено как путем измерения межплоскостных расстояний на картине ВРПЭМ, так и по дифракционной картине — наличию дополнительных рефлексов (рис. 5, в).

Ниже предложено объяснение наблюдаемых закономерностей. Известно, что совершенство рекристаллизованных слоев в процессе твердофазной эпитаксии зависит от многих факторов — ориентации подложки, параметров имплантации и отжига, присутствующих в подложке примесей и др. [17,

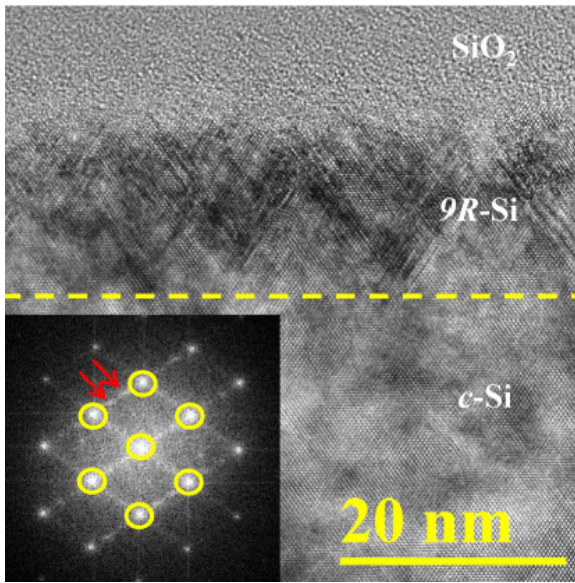


Рис. 3. Снимок ВРПЭМ поперечного среза (110) образца  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  (100) облученного ионами  $\text{Kr}^+$  с последующим отжигом. На вставке приведена картина Фурье преобразования снимка ВРПЭМ (желтыми кружками обозначены рефлексы  $c\text{-Si}$ , а красными стрелками — дополнительные рефлексы)

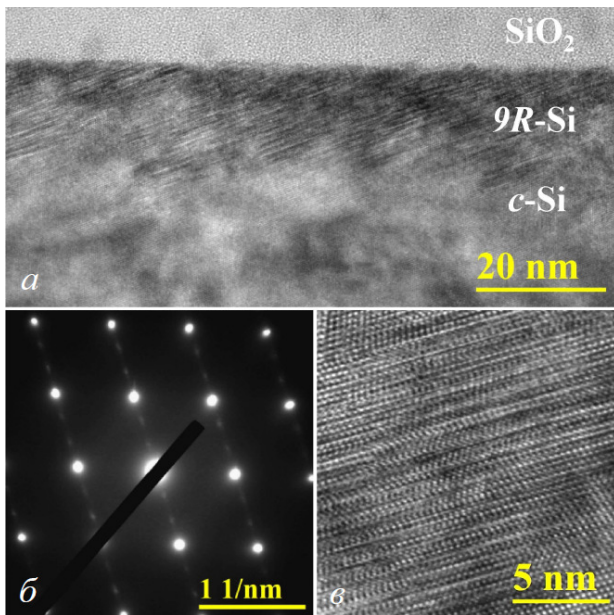


Рис. 4. Снимок ВРПЭМ поперечного среза (110) образца  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  (112) облученного ионами  $\text{Kr}^+$  с последующим отжигом (а), картина дифракции этого образца (б) и увеличенное изображение участка фазы 9R-Si (в)

19]. Согласно литературным данным, при больших концентрациях имплантированных примесей при рекристаллизации могут возникать различные протяженные дефекты, что часто связывают с наличием напряжений, создаваемых атомами примеси [14, 19, 20]. В нашем случае возникновение напряжений может быть обусловлено несколькими обстоятельствами.

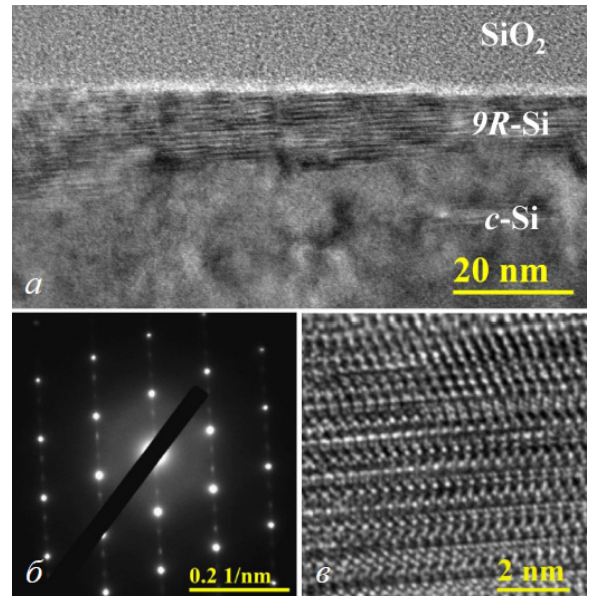


Рис. 5. Снимок ВРПЭМ поперечного среза (110) образца  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  (111), облученного ионами  $\text{Kr}^+$  с последующим отжигом (а), картина дифракции этого образца (б) и увеличенное изображение участка фазы 9R-Si (в)

1. При облучении кремния через пленку  $\text{SiO}_2$  в условиях, когда средний проецированный пробег ионов существенно меньше толщины пленки, максимум первичных радиационных дефектов в кремнии расположен у границы  $\text{SiO}_2 - \text{Si}$ , и градиент их концентрации велик (рис. 1, б). В этом случае локальные напряжения могут возникать за счет наличия вакансионных и междоузельных комплексов.
2. Поскольку из пленки в подложку в процессе имплантации проникает большое количество атомов отдачи кислорода, это может приводить к образованию связей  $\text{O-Si-O}$ , создающих локальные напряженные области [20]. Перекрывание таких областей приводит к образованию напряженного слоя. Кроме того, при взаимодействии атомов кислорода с вакансионными комплексами может возникнуть дисбаланс между противоположными по знаку напряжениями, создаваемыми вакансионными и междоузельными комплексами, что приводит к усилению макроскопических латеральных напряжений.
3. Механические напряжения должны возникать при отжиге системы  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  из-за различия коэффициентов термического расширения  $\text{SiO}_2$  и  $\text{Si}$ , а также за счет присутствия в пленке (по крайней мере, на начальной стадии отжига) крупных атомов криптона.

Итак, резонно считать, что в процессе отжига фронт твердотельной кристаллизации находится под действием латеральных напряжений, которые, особенно при наличии большого градиента этих напряжений, могут вызывать скольжение

смежных плотноупакованных слоев (111) исходного *c*-Si, и тем самым создавать «пачки» дефектов упаковки. Как уже сказано выше, такие «пачки» можно рассматривать как включения фазы 9R-Si. (Альтернативную точку зрения [14], согласно которой наблюдаемые «пачки» являются результатом перекрытия дефектов упаковки, мы считаем менее обоснованной, так как перекрытие носит случайный (стохастический) характер и вряд ли может приводить к образованию непрерывного трансформированного слоя). Скольжению способствует напряженное состояние межатомных связей, при котором снижается энергия, необходимая для их разрыва в процессе перестройки. Стоит также заметить, что при используемой в работе температуре отжига ( $800^{\circ}\text{C}$ ) кремний становится пластичным, и сдвиг атомных плоскостей происходит более эффективно, чем при более низких температурах отжига ( $550^{\circ}\text{C}$ – $600^{\circ}\text{C}$ ), чаще всего используемых при твердофазной эпитаксии. Это объясняет то обстоятельство, что «пачки» дефектов упаковки или гексагональной фазы Si наблюдаются не во всех работах по твердофазной рекристаллизации.

Различия между случаями облучения образцов с разной ориентацией поверхности можно интерпретировать следующим образом. При прочих равных условиях сдвиг плотноупакованных плоскостей под действием силы, обусловленной напряжением, тем вероятнее, чем больше величина проекции силы на данное семейство плоскостей, то есть чем меньше угол между вектором латеральной силы и семейством. Вектор силы, связанный с латеральным напряжением, направлен параллельно поверхности образца. Тогда очевидно, что в случае образца с номинальной ориентацией (111) действующая сила будет оказывать наибольшее действие на семейство плоскостей {111}, образующее в нашем случае с поверхностью угол  $4^{\circ}$ , и формирование фазы 9R-Si будет для этой ориентации наиболее выражено. Для образца с ориентацией поверхности (112) наименьший угол семейства {111} с поверхностью составляет  $20^{\circ}$ , что больше, чем для образца с ориентацией поверхности (111), но меньше, чем для образца с ориентацией (100), для которой номинальный угол семейства {111} с поверхностью составляет  $54^{\circ}$ . Поэтому наилучшие условия для скольжения существуют для ориентации (100), и в этом случае мы действительно наблюдаем лишь отдельные включения 9R-Si. Данная интерпретация согласуется и с тем фактом, что для образцов (111) и (112) наблюдается только одна ориентация плоскостей новой фазы, поскольку для других возможных ориентаций указанный угол слишком близок к  $90^{\circ}$ .

Возникает вопрос, почему в нашем случае образуется именно фаза 9R-Si, а не другая гексагональная фаза? Структура фазы 9R-Si отличается от других гексагональных модификаций Si тем, что ее элементарная ячейка характеризуется таким же расположением атомов на гранях, перпендикулярных гексагональной оси, что и на грани (111) ячейки 3C-Si утроенной вдоль оси (111) [10]. Поэтому ее сопря-

жение с «материнской» фазой при указанных выше условиях требует меньшей затраты свободной энергии по сравнению с другими гексагональными фазами Si.

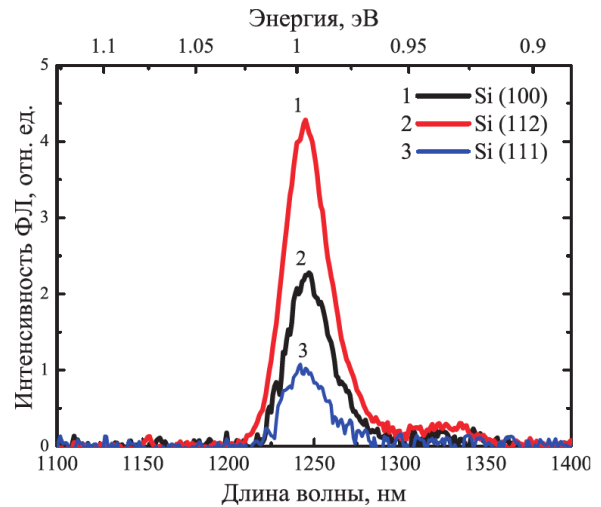


Рис. 6. Спектры ФЛ образцов  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  с разной ориентацией поверхности подложки, облученных ионами  $\text{K}^+$  с последующим отжигом при  $800^{\circ}\text{C}$

Изучение люминесцентных свойств полученных структур методом ФЛ показало, что для всех трех типов образцов наблюдается ФЛ при длине волны  $\sim 1240$  нм (рис. 6). Ранее предполагалось, что за данное излучение ответственна межзонная люминесценция фазы 9R-Si [10]. Однако, дополнительные эксперименты по послойному травлению подложки кремния показали, что максимальная интенсивность ФЛ наблюдается после травливания слоя, в котором сосредоточены включения фазы 9R-Si [21]. Поэтому следует констатировать, что за данное излучение при  $\sim 1240$  нм ответственны не эти включения, а светоизлучающие комплексы дефектов, образованные в процессе имплантации. О влиянии ориентации на интенсивность ФЛ нельзя судить по данным зависимостям, так как образцы с разной ориентацией отличались по концентрации носителей заряда и типу проводимости. Природа светоизлучающих центров и закономерности ФЛ более подробно обсуждаются в [21].

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом ВРПЭМ было обнаружено образование гексагонального кремния — фазы 9R-Si — в образцах  $\text{SiO}_2/\text{Si}$ , облученных ионами  $\text{K}^+$  с последующим отжигом при  $800^{\circ}\text{C}$ . Предполагается, что формирование данной фазы происходит в процессе твердофазной эпитаксии при наличии механических напряжений, способствующих взаимному скольжению плотноупакованных плоскостей кремния. Предложена модель, согласно которой гексагонализация происходит тем эффективнее, чем меньший угол плотноупакованные атомные плоскости

семейства {111} составляют с поверхностью.

Продемонстрированная в настоящей работе возможность формирования тонких слоев гексагонального полиптипа кремния (фазы 9R-Si) на подложке обычного c-Si обеспечивает возможность практического использования и создания полиптипных гетероструктур на основе кремния. Кроме того, обнаружение линии ФЛ при 1240 нм в образцах с фазой 9R-Si открывает дополнительные перспективы для разработки многофункциональных кремниевых микро-, нано- и оптоэлектронных устройств.

Работа выполнена в рамках Программы страте-

гического академического лидерства «Приоритет 2030» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации. Никольская А.А. признательна за поддержку в рамках Стипендии Президента РФ (СП-1894.2021.5). В работе использовалось оборудование Центра коллективного пользования ИФМ РАН «Физика и технология микро- и наноструктур». Плазмохимическое травление образцов выполнялись в лаборатории диагностики радиационных дефектов в твердотельных наноструктурах ИФМ РАН при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (г/з № 0030-2021-0030).

- [1] Fan L., Yang D., Li D. // *Materials*. **14**, N 14. 3964. (2021).
- [2] Liu X., Wang D. // *Nano Res.* **2**, N 7. 575. (2009).
- [3] Raffy C., Furthmüller J., Bechstedt F. // *Phys. Rev. B*. **66**, N 7. 075201. (2002).
- [4] Fabbri F., Rotunno R., Lazzarini L. et al. // *Sci. Rep.* **4**, N 3603. 1. (2014).
- [5] Lee Y., Woo Y., Lee D., Kim I. // *Sol. Energy*. **208**. 957. (2020). 10.1016/j.solener.2020.08.063
- [6] Liang T., Xiong L., Lou H et al. // *Scr. Mater.* **220**, 114936. (2022).
- [7] Servidori M., Cannavm S., Ferla G. et al. // *Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B*. **19–20**. 317. (1987).
- [8] Fabbri F., Rotunno E., Lazzarini L. et al. // *Nano Lett.* **13**, N 12. 5900. (2013).
- [9] Королев Д.С., Никольская А.А., Кривулин Н.О. и др. // Письма в Журнал технической физики. (2017). **43**, № 16. С. 87–92. (Korolev D.S., Nikolskaya A.A., Krivulin N.O. et al. // *Technical Physics Letters*. **43**, N 8. 767. (2017). )
- [10] Nikolskaya A.A., Korolev D.S., Mikhaylov A.N. et al. // *Appl. Phys. Lett.* **113**, N 18, 182103. (2018).
- [11] Кульницкий Б.А., Гордеева Т.А., Овсянников Д.А. и др. // Изв. вузов. Химия и хим. технология. **63**, №12. 10. (2020). (Kulnitskiy B.A., Gordeeva T.A., Ovsyannikov D.A. et al. // *J. Chem. & Chem. Tech.* **63**, N 12. 10. (2020). )
- [12] Vincent L., Djomani D., Fakfakh M. et al. // *Nanotechnol.* **29**, N 12. 125601. (2018).
- [13] Павлов Д.А., Пирогов А.В., Кривулин Н.О., Бобров А.И. // ФТП. **49**, №1. 98. (2015). (Pavlov D.A., Pirogov A.V., Krivulin N.O., Bobrov A.I. // *Semiconductors*. **49**, N 1. 95. (2015). )
- [14] Rudawski N.G., Lind A.G., Martin T.P. // *Semiconductors and Semimetals*. **91**. 123. (2015).
- [15] Ziegler J.F., Ziegler M.D., Biersack J.P. // *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*. **268**. 11. (2010).
- [16] Carter G. // *Radiat. Eff. Lett.* **86**. 25. (1983).
- [17] Johnson B.C., McCallum J.C., Aziz M.J. // *Handbook of Crystal Growth: Thin Films and Epitaxy: Second Edition*. Second Edi. Elsevier. **3**. 317. (2015).
- [18] Gu L., Yu Y., Sigle W. et al. // *Appl. Phys. Lett.* **97**, N 21. 4. (2010).
- [19] Rudawski N.G., Jones K.S., Morarka S. et al. // *J. Appl. Phys.* **105**, N 8. 081101. (2009).
- [20] Narayan J. // *J. Appl. Phys.* **53**, N 12. 8607. (1982).
- [21] Nikolskaya A.A., Korolev D.S., Mikhaylov A.N. et al. // *Mat. Lett.* **342**. 134302. (2023).

## Formation of Hexagonal Phase 9R-Si in SiO<sub>2</sub>/Si System upon Kr<sup>+</sup> Ion Implantation

A.A. Nikolskaya<sup>1,a</sup>, D.S. Korolev<sup>1</sup>, A.N. Mikhaylov<sup>1</sup>, A.A. Konakov<sup>1</sup>, A.I. Okhapkin<sup>2</sup>, S.A. Kraev<sup>2</sup>, A.I. Andrianov<sup>1</sup>, A.D. Moiseev<sup>1</sup>, A.A. Sushkov<sup>1</sup>, D.A. Pavlov<sup>1</sup>, D.I. Tetelbaum<sup>1,b</sup>

<sup>1</sup>Research Institute of Physics and Technology, Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod Nizhny Novgorod, 603022, Russia

<sup>2</sup>Institute for Physics of Microstructures of the Russian Academy of Sciences (IPM RAS). Nizhny Novgorod, 603950, Russia

E-mail: <sup>a</sup>nikolskaya@nifti.unn.ru, <sup>b</sup>tetelbaum@phys.unn.ru

Hexagonal silicon polytypes have attracted significant attention within the scientific community due to their potential applications in next-generation electronics and photonics. However, obtaining stable heterostructures based on cubic and hexagonal polytypes is a challenging task. This study demonstrates the synthesis of thin layers of the hexagonal phase of silicon, specifically 9R-Si, using a conventional microelectronics technique—ion implantation. Implantation of Kr<sup>+</sup> ions was performed through a SiO<sub>2</sub> layer, with thickness approximately twice the projected range of Kr<sup>+</sup> ions, followed by high-temperature annealing. High-resolution transmission electron microscopy revealed that damage to Si substrate at the SiO<sub>2</sub> interface resulted in the formation of a thin amorphous layer, which recrystallized during annealing, leading to the formation of the 9R-Si polytype. It is presumed that mechanical stresses induced by implantation through the oxide layer promote hexagonalization during subsequent high-temperature annealing. The effectiveness of hexagonalization was found to depend on the substrate orientation. In addition to the formation of the 9R-Si

phase, under the utilized implantation and annealing parameters, silicon exhibited light-emitting defects, with photoluminescence observed at a wavelength of approximately  $\sim 1240$  nm up to temperatures of about  $\sim 120$  K. The obtained results may find applications in silicon micro-, nano-, and optoelectronics.

PACS: 61.72.uf

*Keywords:* silicon, SiO<sub>2</sub>/Si structure, ion implantation, hexagonal silicon polytypes, 9R-Si phase, photoluminescence.

*Received 17 March 2023.*

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2023. 78, No. 3. Pp. 361–367.

#### Сведения об авторах

1. Никольская Алена Андреевна — мл. науч. сотрудник; e-mail: [nikolskaya@nifti.unn.ru](mailto:nikolskaya@nifti.unn.ru).
2. Королев Дмитрий Сергеевич — канд. физ.-мат. наук, науч. сотрудник; e-mail: [dmkorolev@phys.unn.ru](mailto:dmkorolev@phys.unn.ru).
3. Михайлов Алексей Николаевич — канд. физ.-мат. наук, зав. лабораторией; e-mail: [mian@nifti.unn.ru](mailto:mian@nifti.unn.ru).
4. Конаков Антон Алексеевич — канд. физ.-мат. наук, доцент; e-mail: [anton.a.konakov@gmail.com](mailto:anton.a.konakov@gmail.com).
5. Охапкин Андрей Игоревич — канд. хим. наук, науч. сотрудник; e-mail: [poa89@ipmras.ru](mailto:poa89@ipmras.ru).
6. Краев Станислав Алексеевич — вед. технолог; e-mail: [kraev@ipmras.ru](mailto:kraev@ipmras.ru).
7. Андрианов Артем Ильич — инженер, аспирант; e-mail: [artem.beyl@mail.ru](mailto:artem.beyl@mail.ru).
8. Моисеев Андрей Дмитриевич — магистрант; e-mail: [vera.135@mail.ru](mailto:vera.135@mail.ru).
9. Сушков Артем Александрович — мл. науч. сотрудник; e-mail: [sushkovartem@gmail.com](mailto:sushkovartem@gmail.com).
10. Павлов Дмитрий Алексеевич — доктор физ.-мат. наук, зав. кафедрой, профессор; e-mail: [pavlov@unn.ru](mailto:pavlov@unn.ru).
11. Тетельбаум Давид Исаакович — доктор физ.-мат. наук, вед. науч. сотрудник, профессор; e-mail: [tetelbaum@phys.unn.ru](mailto:tetelbaum@phys.unn.ru).