

ISSN 1561-8323 (Print)
ISSN 2524-2431 (Online)

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ
TECHNICAL SCIENCES

УДК 535.34:546.23:546.28
<https://doi.org/10.29235/1561-8323-2026-70-3-249-257>

Поступило в редакцию 26.02.2026
Received 26.02.2026

**Н. С. Ковальчук¹, академик Ф. Ф. Комаров², И. Н. Пархоменко³,
Гофэн Ян⁴, О. В. Мильчанин²**

¹ОАО «Интеграл», Минск, Республика Беларусь
ул. Казинца, 121А, 220108, Минск, Республика Беларусь

²Институт прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко
Белорусского государственного университета, Минск, Республика Беларусь
ул. Курчатова, 7, 220045, Минск, Республика Беларусь

³Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь
ул. Курчатова, 5, 220045, Минск, Республика Беларусь

⁴Школа науки, Цзяннаньский университет, Уси, Китайская Народная Республика
пр-т Лиху, 1800, 214122, Уси, Китай

**ПОДЗОННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ И СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА КРЕМНИЯ,
ГИПЕРДОПИРОВАННОГО СЕЛЕНОМ,
ПОСЛЕ ИМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРНОГО ОТЖИГА**

Аннотация. Исследовано формирование примесной подзоны в кремнии, гипердопированном селеном, после импульсного лазерного отжига. Образцы Si имплантировались ионами Se⁺ в моно- и полиэнергетических режимах с концентрацией примеси 0,4–2,2 ат. %, после чего проводились режимы импульсного лазерного отжига при плотностях энергии 0,55–2,5 Дж/см². Глубинные профили концентрации примеси, степень кристалличности слоев и доля атомов селена в положении замещения определялись методом резерфордского обратного рассеяния в сочетании с режимом каналирования. Методом сканирующей туннельной спектроскопии подтверждено формирование подзонных состояний. В спектрах поглощения отчетливо проявляется широкая полоса подзонного поглощения с максимумом в области ~0,45–0,55 эВ и шириной около ~0,5 эВ. Показано, что интенсивность подзонного поглощения увеличивается с ростом концентрации замещающего Se, однако эта зависимость носит нелинейный характер. Наилучшие структурные параметры слоев (максимальные значения степени кристалличности и доли атомов Se в узлах решетки) достигаются после импульсного лазерного отжига при 1,5–2,5 Дж/см², при этом интенсивность подзонного поглощения изменяется немонотонно и не коррелирует строго со структурными характеристиками. Полученные результаты имеют практическую значимость для разработки оптоэлектронных устройств на основе гипердопированного кремния с управляемыми свойствами подзонного поглощения.

Ключевые слова: кремний, имплантация Se, импульсный лазерный отжиг, подзона, поглощение

Для цитирования. Подзонное поглощение и структурные свойства кремния, гипердопированного селеном, после импульсного лазерного отжига / Н. С. Ковальчук, Ф. Ф. Комаров, И. Н. Пархоменко [и др.] // Доклады Национальной академии наук Беларуси. – 2026. – Т. 70, № 3. – С. 249–257. <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2026-70-3-249-257>

**Natalia S. Kovalchuk¹, Academician Fadei F. Komarov², Irina N. Parkhomenko³,
Guofeng Yang⁴, Oleg V. Milchanin²**

¹Joint Stock Company “Integral”, Minsk, Republic of Belarus
121A, Kazinets Str., 220108, Minsk, Republic of Belarus

²A. N. Sevchenko Institute of Applied Physics Problems of the Belarusian State University, Minsk, Republic of Belarus
7, Kurchatov Str., 220045, Minsk, Republic of Belarus

³Belarusian State University, Minsk, Republic of Belarus
5, Kurchatov Str., 220108, Minsk, Republic of Belarus

⁴School of Science, Jiangnan University, Wuxi, China
1800, Lihu Avenue, 214122, Wuxi, China

**SUB-BANDGAP ABSORPTION AND STRUCTURAL PROPERTIES
OF SELENIUM-HYPERDOPED SILICON AFTER PULSED LASER ANNEALING**

Abstract. The formation of impurity sub-band states in selenium-hyperdoped silicon after pulsed laser annealing was investigated. Si samples were implanted with Se⁺ ions in single- and multi-energy regimes with dopant concentrations of 0.4–2.2 at. %, followed by pulsed laser annealing at energy densities of 0.55–2.5 J/cm². Depth profiles of the dopant concentration,

the degree of crystallinity, and the fraction of Se atoms occupying substitutional lattice sites were determined by Rutherford backscattering spectrometry in channeling mode. The formation of sub-band states was confirmed by scanning tunneling spectroscopy. The absorption spectra show a pronounced broad sub-band absorption band with a maximum at $\sim 0.45\text{--}0.55$ eV and a width of ~ 0.5 eV. It was found that the sub-band absorption intensity increases with the concentration of substitutional Se atoms, although this dependence is nonlinear. The optimal structural parameters (maximum crystallinity and substitutional Se fraction) are achieved after pulsed laser annealing at $1.5\text{--}2.5$ J/cm²; however, the sub-band absorption intensity varies non-monotonically and does not strictly correlate with these structural characteristics. These findings are relevant for the design of optoelectronic devices based on hyperdoped silicon with controllable sub-band absorption characteristics.

Keywords: silicon, Se implantation, pulsed laser annealing, sub-band states, absorption

For citation. Kovalchuk N. S., Komarov F. F., Parkhomenko I. N., Guofeng Yang, Milchanin O. V. Sub-bandgap absorption and structural properties of selenium-hyperdoped silicon after pulsed laser annealing. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi = Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2026, vol. 70, no. 3, pp. 249–257 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2026-70-3-249-257>

Введение. Кремний, гипердопированный халькогенами (S, Se, Te), привлекает значительное внимание благодаря способности проявлять сильное подзонное поглощение при энергиях значительно ниже фундаментальной ширины запрещенной зоны Si ($\sim 1,12$ эВ). Это открывает возможности для применения в инфракрасных фотодетекторах и фотопреобразователях с промежуточной зоной. Гипердопирование, превышающее равновесную растворимость, приводит к появлению глубоких примесных состояний внутри запрещенной зоны, формирующих промежуточную подзону, ответственную за широкополосное оптическое поглощение в ближнем и среднем инфракрасном диапазоне [1–4]. Интенсивность и ширина этой полосы зависят от концентрации примеси, однако при достаточно высокой концентрации может происходить переход изолятора в металл [1]. Дополнительные термообработки зачастую приводят к снижению интенсивности поглощения, что свидетельствует о важной роли химического состояния и локальной координации примеси для оптической активности [3; 4].

Несмотря на значительный прогресс в изучении халькоген-гипердопированного Si, остается мало информации о взаимосвязи между концентрацией, положением атомов примеси, степенью кристалличности и оптическим откликом в ИК-диапазоне. В данной работе исследованы образцы Si, гипердопированные Se, подготовленные методом ионной имплантации и последующего импульсного лазерного отжига при различных плотностях энергии импульса. Особое внимание в работе уделено влиянию концентрации примеси в положениях замещения и степени структурного восстановления кристаллической матрицы на характеристики подзонного поглощения в среднем инфракрасном диапазоне.

Материалы и методы исследования. Образцы, вырезанные из пластин Si *p*-типа проводимости с удельным сопротивлением $\rho = 10$ Ом·см, имплантировались ионами Se⁺ при комнатной температуре. Часть образцов имплантировалась с энергией ионов Se⁺ 140 кэВ и флюенсами $3,1 \cdot 10^{15}$ и $6,1 \cdot 10^{15}$ см⁻². Далее образцы подвергались импульсному лазерному отжигу (ИЛО) при значении плотности энергии $W = 2$ Дж/см² в наносекундном (75 нс) импульсе излучения рубинового лазера ($\lambda = 694$ нм). Вторая часть образцов имплантировалась в полиэнергетическом режиме. Энергии и флюенсы ионов на первом и втором этапах имплантации составляли соответственно 220 кэВ и $1,45 \cdot 10^{16}$ см⁻² и 100 кэВ, $5,12 \cdot 10^{15}$ см⁻². Такой выбор энергий и флюенсов ионов, смоделированный теоретически, обеспечивает более однородное распределение внедренной примеси по глубине. ИЛО данных образцов проводился при значениях плотности энергии $W = 0,5; 0,8; 1; 1,5; 2$ и $2,5$ Дж/см². Оптическая схема лазерной установки обеспечивала высокую однородность распределения энергии импульса излучения лазера по зоне ИЛО размером 4×4 мм; отклонение в распределении плотности энергии падающего излучения относительно средней по лазерному пятну величины W не превышало ± 5 %.

Анализ глубинного распределения концентрации внедренной примеси, доли атомов селена, занимающих узлы кристаллической решетки кремния, а также степени кристалличности имплантированных слоев выполнялся методом регистрации спектров резерфордовского обратного рассеяния (РОР) ионов He⁺ с энергией 1,5 МэВ. Измерения проводились как в режиме каналирования (вдоль направления $\langle 100 \rangle$), так и в случайной ориентации на ускорительном комплексе HVE-2500 при угле регистрации 170° . Информация о распределении концентрации атомов селена по глуби-

не была получена путем обработки спектров POP с использованием программного комплекса SIMNRA [5]. Моделирование спектров в данной программе выполнялось пошагово до достижения полного совпадения расчетных и экспериментальных данных.

Для оценки степени кристалличности легированного слоя кремния и определения доли атомов Se в узлах кристаллической решетки Si использованы величины χ^{Si} и χ^{Se} , извлекаемые из спектров POP. Данные величины представляют собой интегральные отношения числа зарегистрированных импульсов в каналированном и случайном спектрах в каналах энергии, связанных со слоем имплантированного Si и Se соответственно. Степень кристалличности $f_{\text{кр}}$ отожденного слоя рассчитывалась по формуле из работы [6]

$$f_{\text{кр}} = \frac{1 - \chi^{\text{Si}}}{1 - \chi^{\text{мин}}}$$

Доля атомов селена $f_{\text{зам}}$, занимающих узлы решетки вдоль заданного осевого направления, определялась по формуле [6]

$$f_{\text{зам}} = \frac{1 - \chi^{\text{Se}}}{1 - \chi^{\text{мин}}}$$

Параметр $\chi^{\text{мин}}$ соответствует значению для высококачественной решетки Si; в нашем случае, с учетом характеристик ускорительного комплекса и качества исходных кремниевых пластин, он был принят равным 0,05.

Режимы имплантации и отжига, а также рассчитанные величины $f_{\text{кр}}$ и $f_{\text{зам}}$ приведены в таблице.

Степень кристалличности слоев кремния ($f_{\text{кр}}$) и доля примеси в узлах кристаллической решетки ($f_{\text{зам}}$) после имплантации и ИЛО при различных плотностях энергии в лазерном импульсе (W)

The degree of crystallinity of the silicon layers (f_{cr}) and the fraction of impurity atoms occupying substitutional lattice sites (f_{subst}) after implantation and pulsed laser annealing at different laser pulse energy densities (W)

Образец Sample	Энергия и флюенс имплантации Implantation energy and fluence	W , Дж/см ² W , J/cm ²	Концентрация Se в максимуме, % Peak Se concentration, %	$f_{\text{кр}}$, % f_{cr} , %	$f_{\text{зам}}$, % f_{subst} , %
1	140 кэВ, $3,1 \cdot 10^{15}$ см ⁻²	2,0	0,4	93,6	72,0
2	140 кэВ, $6,1 \cdot 10^{15}$ см ⁻²	2,0	0,6	91,9	69,6
3	220 кэВ, $1,45 \cdot 10^{16}$ см ⁻² + 100 кэВ, $5,12 \cdot 10^{15}$ см ⁻²	0,55	2,5	22,6	1,8
4	220 кэВ, $1,45 \cdot 10^{16}$ см ⁻² + 100 кэВ, $5,12 \cdot 10^{15}$ см ⁻²	0,8	2,6	75,7	44,6
5	220 кэВ, $1,45 \cdot 10^{16}$ см ⁻² + 100 кэВ, $5,12 \cdot 10^{15}$ см ⁻²	1,0	2,3	72,0	37,9
6	220 кэВ, $1,45 \cdot 10^{16}$ см ⁻² + 100 кэВ, $5,12 \cdot 10^{15}$ см ⁻²	1,5	2,1	81,8	55,4
7	220 кэВ, $1,45 \cdot 10^{16}$ см ⁻² + 100 кэВ, $5,12 \cdot 10^{15}$ см ⁻²	2	1,8	91,6	65,6
8	220 кэВ, $1,45 \cdot 10^{16}$ см ⁻² + 100 кэВ, $5,12 \cdot 10^{15}$ см ⁻²	2,5	1,8	86,6	49,6

Измерения методом сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и спектроскопии (СТС) проводились с использованием низкотемпературной установки компании Createc при базовом давлении $3 \cdot 10^{-11}$ мбар и температуре жидкого азота. Данные СТМ получались в режиме постоянного тока с использованием одноосного (001) вольфрамового кристаллического наконечника. Образцы подвергались распылению ионами Ar с энергией 750 эВ при давлении $2 \cdot 10^{-5}$ мбар в течение 10 мин в камере подготовки.

Оптические свойства в спектральном диапазоне 0,2–2,5 мкм исследовались путем измерения спектров пропускания и зеркального отражения с использованием спектрофотометра Lambda 1050 UV/Vis/NIR. Спектры зеркального отражения регистрировались при угле падения 8° с применением приставки Universal Reflectance Accessory с точностью 0,1 %. Оптические свойства в среднем инфракрасном диапазоне (2–20 мкм) изучались с использованием ИК-фурье спектрометра Spectrum 3 Optica (PerkinElmer, США). Для регистрации спектров отражения использовалась приставка 10Spec (Pike Technologies). Оптическое поглощение (A) в исследуемых слоях кремния рассчитывалось по спектрам пропускания (T , %) и отражения (R , %) по формуле $A = 100 \% - R - T$. В области прозрачности нелегированного кремния (>1 мкм) исследовалась величина ad (где a –

коэффициент поглощения, а d – толщина имплантированного слоя), а не коэффициент α , поскольку концентрация примеси в гипердопированном слое неоднородна по глубине.

Результаты и их обсуждение. *Формирование подзоны в Si гипердопированном Se.* В соответствии с теорией Мотта [7] критическая концентрация донорных электронов $N^{\text{кр}}$ для осуществления перехода диэлектрик–металл в полупроводниках может быть оценена из выражения

$$N^{\text{кр}} = \left(\frac{c}{a_H} \right)^3,$$

где $c = 0,25$ – константа; a_H – радиус Бора донорных электронов. Величина радиуса Бора может быть представлена как

$$a_H^* = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0\epsilon_r E_d},$$

где e – заряд электрона; ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума; ϵ_r – высокочастотная диэлектрическая постоянная кремния; E_d – энергия активации локализованных состояний. Тогда, учитывая величину энергии активации $E_d = 0,307$ эВ для атомов селена в решетке кремния [8], изотропный радиус Бора в соответствии с критерием Мотта составляет $2,02$ Å. Следовательно, критическая концентрация электронов для обеспечения перехода изолятор–металл в гипердопированном селеном кремнии приблизительно равна $1,91 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$, что соответствует концентрации атомов Se $9,5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ (1,9 ат. %), так как каждый замещающий атом Se является двойным донором.

Высокой концентрации замещающего селена соответствует определенная ширина примесной подзоны ($\Delta E_{\text{ПП}}$) [9]

$$\Delta E_{\text{ПП}} = \frac{e^2 N^{\frac{1}{3}}}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r}.$$

Строгие расчеты из первых принципов на основе теории функционала плотности [10] для кремния с уровнем легирования селеном $\sim 0,47$ ат. % ширину примесной подзоны определяют в $0,22$ эВ. Она располагается на расстоянии $\sim 0,4$ эВ от валентной зоны и на расстоянии $\sim 0,50$ эВ от зоны проводимости.

Для образца, имплантированного меньшей дозой $3,1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ и прошедшего ИЛО при $W = 2 \text{ Дж/см}^2$, удалось подтвердить формирование подзоны методом сканирующей туннельной микроскопии и спектроскопии. Концентрация в максимуме примеси для данного образца состав-

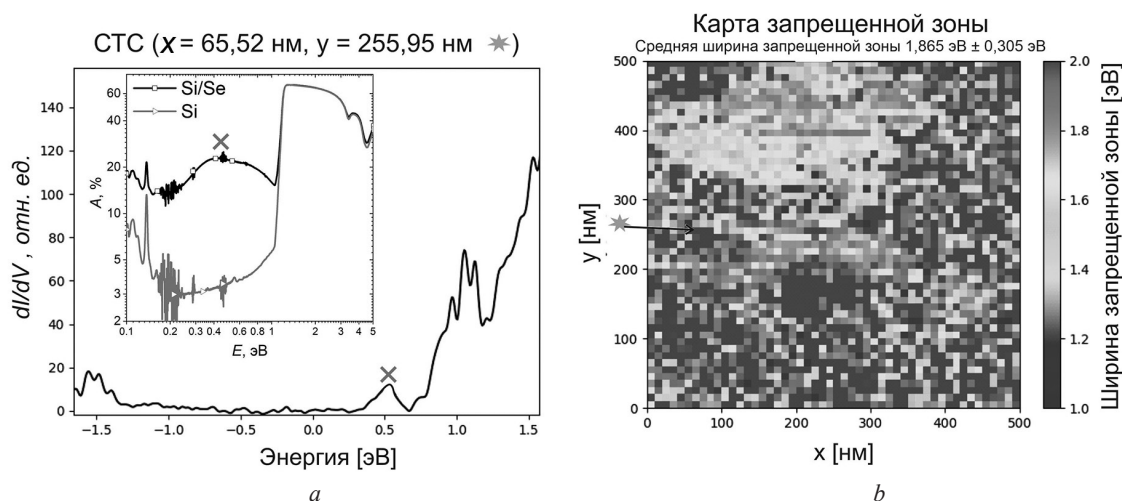


Рис. 1. Данные СТС (а) для кремния, имплантированного Se (140 кэВ, $3,1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$), после ИЛО ($W = 2 \text{ Дж/см}^2$) в точке, отмеченной звездочкой на карте ширины запрещенной зоны (b). На вставке показан спектр поглощения данного образца. Крестиками отмечено положение подзоны

Fig. 1. STS data (a) obtained on the Se-implanted silicon (140 keV, $3,1 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$) after PLA ($W = 2 \text{ J/cm}^2$) at the position marked with star on the bandgap map (b). The inset shows the absorption spectrum of this sample.

The crosses indicate the sub-band position

ляет 0,4 ат. %. На рис. 1 показана визуализация пространственных флуктуаций зонной структуры, полученная методом СТС, и карта ширины запрещенной зоны по данным СТМ-исследований. Средняя ширина запрещенной зоны поверхности составляет $1,865 \pm 0,31$ эВ, что согласуется с данными других работ [11; 12]. Более высокое значение ширины запрещенной зоны по сравнению с табличным (1,12 эВ) может быть обусловлено поверхностными загрязнениями и/или параметрами сканирования, такими как высокое смещение, способное вызывать изгиб зон [12]. Данные СТС выявляют существование подзонных состояний в диапазоне от 0,48 до 0,6 эВ выше уровня Ферми. Среднее положение для 5 пар измерений в различных точках (x, y) образца составляет 0,55 эВ. Ширина промежуточной зоны варьируется от 0,15 до 0,3 эВ.

На вставке на рис. 1, *a* показан спектр поглощения для данного образца. Как видно из рисунка имплантация Se с последующим ИЛО сопровождается появлением широкой полосы поглощения в области прозрачности нелегированного кремния. Положение максимума находится при 0,4–0,5 эВ, ширина на полувысоте составляет около 0,55 эВ.

Влияние концентрации примеси. На рис. 2 *a, b* представлены профили распределения примеси по глубине и соответствующие спектры оптического поглощения в координатах αd для образцов

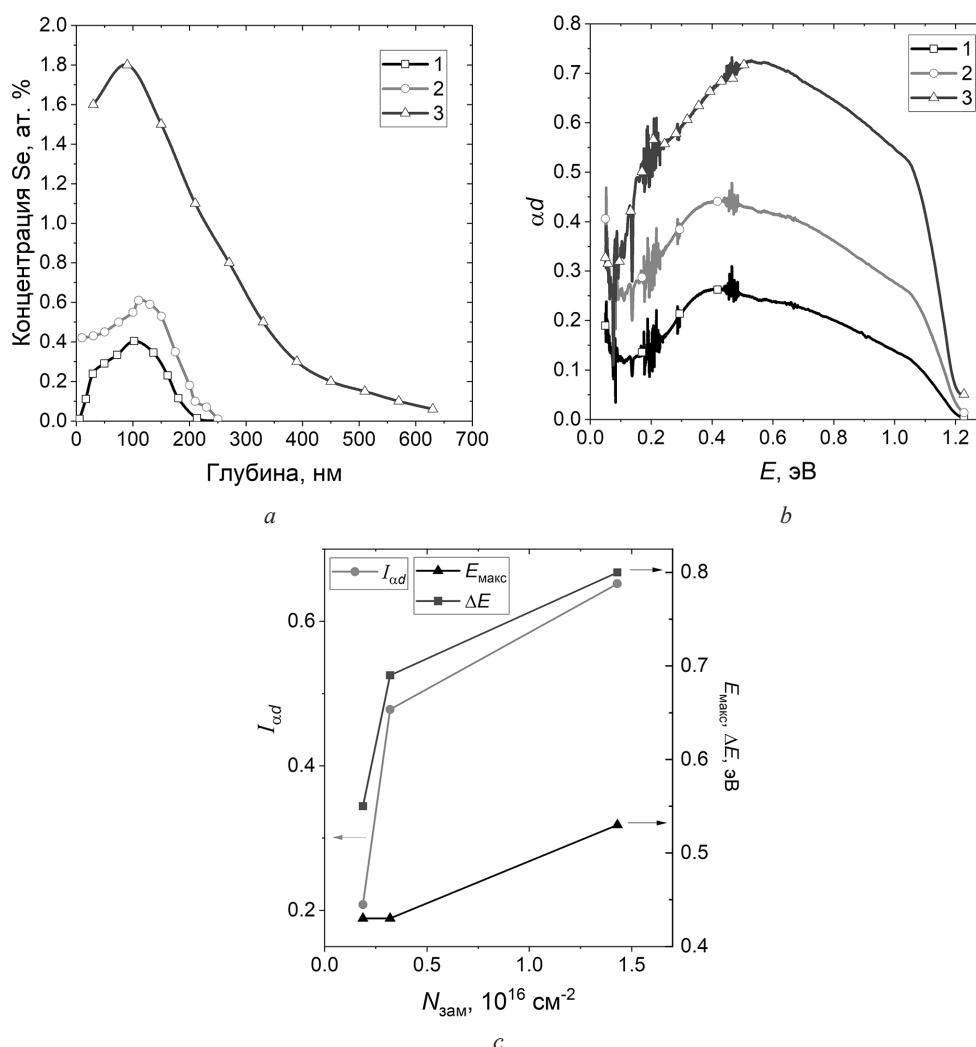


Рис. 2. Профили концентрации Se (*a*), спектры подзонного поглощения (*b*) и зависимости интенсивности $I_{\alpha d}$, положения максимума $E_{\text{макс}}$ и ширины полосы ΔE подзонного поглощения от $N_{\text{зам}}$ (*c*) для образцов № 1, 2, 7 после ИЛО при $W = 2$ Дж/см²

Fig. 2. Se concentration depth profiles (*a*), sub-bandgap absorption spectra (*b*), and the dependences of the integral intensity peak $I_{\alpha d}$, position $E_{\text{макс}}$ and bandwidth ΔE of the sub-bandgap absorption on N_{subst} (*c*) for samples No 1, 2 and 7 after pulsed laser annealing at $W = 2$ J/cm²

№ 1, 2 и 7. Образцы были имплантированы в различных режимах, однако подвергались одинаковому ИЛО при $W = 2$ Дж/см². Степень кристалличности и доля атомов Se, находящихся в положении замещения, для данных образцов сопоставимы (таблица), тогда как концентрация примеси и глубина ее залегания существенно различаются. Согласно теоретическим соображениям, изложенным в [13], интеграл величины αd по энергии должен быть пропорционален интегралу по глубинному профилю распределения примеси с учетом доли атомов, занимающих узлы кристаллической решетки. Иными словами,

$$\int_{0,2 \text{ эВ}}^{1 \text{ эВ}} \alpha d \propto f_{\text{зам}} \int_0^d N(x) dx, \quad (1)$$

где $N(x)$ – концентрация примеси по глубине; d – глубина ее залегания.

Интеграл в левой части выражения (1) обозначим как I_{ad} – интенсивность полосы подзонного поглощения, а величину в правой части обозначим как $N_{\text{зам}}$ – поверхностная плотность примесных атомов, находящихся в положении замещения. На рис. 2, с представлена зависимость интегральной интенсивности подзонного поглощения I_{ad} , положения максимума $E_{\text{макс}}$ и ширины полосы ΔE подзонного поглощения от $N_{\text{зам}}$. Как следует из рисунка, интенсивность поглощения возрастает с увеличением концентрации примеси в узлах кристаллической решетки, однако зависимость носит нелинейный характер. С ростом $N_{\text{зам}}$ наблюдается уширение полосы подзонного поглощения, что согласуется с моделью формирования и расширением примесной подзоны. При максимальной концентрации $N_{\text{зам}}$ наблюдается смещение положения максимума в область больших энергий на 0,1 эВ. По-видимому, при максимальной концентрации примеси происходит существенное перекрывание примесных состояний и формирование расширенной подзоны, что сопровождается ее уширением и изменением спектрального распределения плотности состояний. Это может приводить к смещению максимума поглощения и отклонению зависимости $I_{ad}(N_{\text{зам}})$ от линейного закона.

Для образца, имплантированного в полиэнергетическом режиме, с наибольшей концентрацией примеси проводился ИЛО при различных плотностях энергии в лазерном импульсе в диапазоне $W = 0,5\text{--}2,5$ Дж/см² (образцы № 3–8). На рис. 3, а и б представлены соответствующие профили распределения концентрации примеси по глубине и спектры оптического поглощения в координатах αd . Как видно из рис. 3, а, форма профилей распределения атомов селена существенно определяется плотностью энергии лазерного импульса. Можно выделить два характерных типа концентрационных распределений, соответствующих диапазонам энергий 0,5–1,0 и 1,5–2,5 Дж/см². При плотностях энергии 0,5–1,0 Дж/см² перераспределение атомов селена вследствие диффузии выражено слабо. Так, профиль концентрации при $W = 0,5$ Дж/см² практически совпадает с профилем неотожженного образца (не показано). При более высоких плотностях энергии (1,5–2,5 Дж/см²) в интервале глубин 30–150 нм формируется платообразный участок распределения селена с концентрацией 1,6–1,9 %, сопровождающийся протяженными диффузионными хвостами, достигающими глубин 500–600 нм. Различия между этими двумя типами профилей обусловлены разной толщиной расплавленного слоя, а также и разным временем существования жидкой фазы кремния, в зависимости от плотности энергии лазерного импульса [14].

Несмотря на небольшую долю примеси в положениях замещения (~1,8 %) и низкой степени восстановления кристаллической матрицы кремния (44 %) после ИЛО при минимальной плотности энергии импульса ($W = 0,5$ Дж/см²) полоса подзонного поглощения отчетливо проявляется в спектре. Увеличение плотности энергии до 1 Дж/см² приводит к росту интегральной интенсивности поглощения (рис. 3, с), тогда как при дальнейшем увеличении W наблюдается тенденция к насыщению. Повышение плотности энергии импульса сопровождается смещением полосы в область меньших энергий. Кроме того, при увеличении W от 0,8 до 2,5 Дж/см² фиксируется заметное уширение полосы.

Согласно данным, представленным в таблице, степень кристалличности слоев кремния $f_{\text{кр}}$ и доля примеси в узлах кристаллической решетки $f_{\text{зам}}$ демонстрируют немонотонную зависимость от плотности энергии лазерного импульса. Это позволяет проследить тонкую взаимосвязь между степенью активации примеси, степенью структурного восстановления и оптическим поглощением

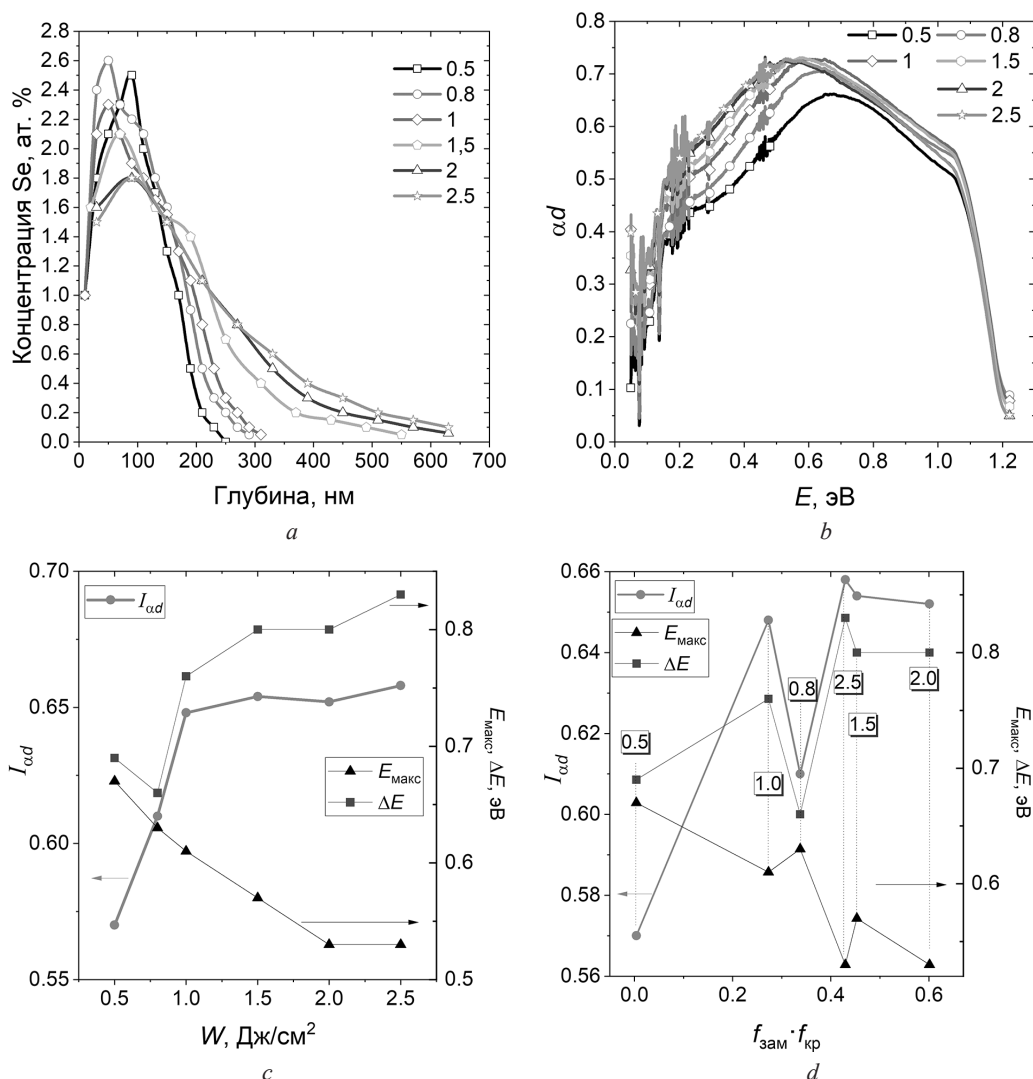


Рис. 3. Профили концентрации Se (a), спектры подзонного поглощения (b) и зависимости интенсивности I_{ad} , положение максимума E_{max} и ширина полосы ΔE подзонного поглощения от плотности энергии лазерного импульса W (c) и от величины $f_{зам} \cdot f_{кр}$ (d) для образца, имплантированного в полиэнергетическом режиме

Fig. 3. Se concentration depth profiles (a), sub-bandgap absorption spectra (b), and the dependences of the integral intensity peak I_{ad} , position E_{max} and bandwidth ΔE of the sub-bandgap absorption on energy density of laser pulse W (c) and on $f_{subst} \cdot f_{cr}$ (d) for polyenergetic implanted sample

при близких значениях объемной концентрации примеси. Ожидается, что увеличение данных параметров должно способствовать усилению подзонного поглощения за счет роста числа оптически активных центров и уменьшения структурного беспорядка. На рис. 3, d приведены зависимости интегральной интенсивности поглощения, положения максимума и ширины полосы от произведения $f_{зам} \cdot f_{кр}$. Как следует из рисунка, зависимость носит немонотонный характер: при $W = 0,8$ Дж/см² наблюдается минимум интенсивности поглощения. Даже при наилучших структурных параметрах, достигаемых после ИЛО в диапазоне 1,5–2,5 Дж/см², строгой корреляции между величиной $f_{зам} \cdot f_{кр}$ и интенсивностью поглощения не прослеживается. При этом максимум полосы систематически смещается в область меньших энергий по мере улучшения структурных характеристик. Следует отметить, что ширина полосы коррелирует с интегральной интенсивностью поглощения, что согласуется с результатами, представленными на рис. 2, c.

Отсутствие строгой корреляции между величиной $f_{зам} \cdot f_{кр}$ и интенсивностью подзонного поглощения свидетельствует о том, что оптический отклик определяется не только числом замещающих атомов и общей степенью кристалличности, но и характером их пространственного распределе-

ния. При концентрациях, близких к критерию Мотта, даже незначительные изменения локальной концентрации могут существенно влиять на степень перекрытия примесных состояний и ширину формирующейся подзоны. Кроме того, при различных режимах ИЛО возможна частичная кластеризация примеси или образование нейтральных комплексов, что уменьшает долю оптически активных центров и изменяет плотность состояний в сформированной подзоне.

Закключение. В работе исследованы структурные и оптические свойства кремния, гипердопированного селеном, в зависимости от режима имплантации и плотности энергии импульсного лазерного отжига в диапазоне 0,5–2,5 Дж/см². Формирование примесной подзоны подтверждается как спектроскопией поглощения, так и методом сканирующей туннельной спектроскопии. В спектре поглощения регистрируется полоса с максимумом при 0,45–0,55 эВ. Показано, что интегральная интенсивность подзонного поглощения коррелирует с плотностью атомов селена в положениях замещения, однако зависимость носит немонотонный характер. Установлено, что наилучшие структурные параметры (максимальная степень кристалличности и доля атомов селена в положении замещения) достигаются после ИЛО при плотностях энергии 1,5–2,5 Дж/см². Однако максимальная интенсивность подзонного поглощения не демонстрирует строгой корреляции с этими параметрами. Таким образом, режим ИЛО, оптимальный с точки зрения кристалличности и активации примеси, не полностью совпадает с режимом, обеспечивающим максимальный подзонный оптический отклик. Это указывает на существенную роль перекрытия примесных состояний, неоднородности распределения примеси и возможной кластеризации при концентрациях, приближающихся к критерию Мотта. Полученные результаты важны для оптимизации режимов гипердопирования кремния при создании ИК-фотодетекторов, селективных поглотителей и других оптоэлектронных устройств на основе подзонных переходов.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проект № Ф26КИ-011). Авторы выражают благодарность К. Жусупбекову за проведение исследований образцов методом сканирующей туннельной спектроскопии и микроскопии.

Acknowledgments. The work was carried out with the financial support of the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (Project No. Ф26КИ-011). The authors acknowledge K. Zhusupbekov for performing the scanning tunneling spectroscopy and microscopy studies of the samples.

Список использованных источников

1. Understanding of sub-band gap absorption of femtosecond-laser sulfur hyperdoped silicon using synchrotron-based techniques / M. V. Limaye, S. C. Chen, C. Y. Lee [et al.] // *Scientific Reports*. – 2015. – Vol. 5. – Art. 11466. <https://doi.org/10.1038/srep11466>
2. Simultaneous high crystallinity and sub-bandgap optical absorptance in hyperdoped black silicon using nanosecond laser annealing / B. Franta, D. Pastor, H. H. Gandhi [et al.] // *Journal of Applied Physics*. – 2015. – Vol. 118, N 22. – Art. 225303. <https://doi.org/10.1063/1.4937149>
3. Mid-infrared absorptance of silicon hyperdoped with chalcogen via fs-laser irradiation / M.-J. Sher, Y.-T. Lin, M. T. Winkler [et al.] // *Journal of Applied Physics*. – 2015. – Vol. 113, N 6. – Art. 063520. <https://doi.org/10.1063/1.4790808>
4. Possible atomic structures responsible for the sub-bandgap absorption of chalcogen-hyperdoped silicon / K.-F. Wang, H. Shao, K. Liu [et al.] // *Applied Physics Letters*. – 2015. – Vol. 107, N 11. – Art. 112106. <https://doi.org/10.1063/1.4931091>
5. Mayer, M. SIMNRA User's Guide / M. Mayer. – Garching, 1997. – 62 p.
6. Feldman, L. C. Materials Analysis by Ion Channeling: Submicron Crystallography / L. C. Feldman, W. Mayer, S. T. Picraux. – New York, 1982. – 300 p.
7. Mott, N. F. Metal-insulator transition / N. F. Mott // *Contemporary Physics*. – 1973. – Vol. 14, N 5. – P. 401–413. <https://doi.org/10.1080/00107517308210764>
8. Schubert, E. F. Doping III–V Semiconductors / E. F. Schubert. – Cambridge, 1993. – 354 p. <https://doi.org/10.1017/cbo9780511599828>
9. High-resolution studies of sulfur- and selenium-related donor centers in silicon / E. Janzén, R. Stedman, G. Grossmann, H. G. Grimmeiss // *Physical Review B*. – 1984. – Vol. 29, N 4. – Art. 1907. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.29.1907>
10. Formation of a reliable intermediate band in Si heavily coimplanted with chalcogens (S, Se, Te) and group III elements (B, Al) / K. Sánchez, I. Aguilera, P. Palacios, P. Wahnón // *Physical Review B*. – 2010. – Vol. 82, N 16. – Art. 165201. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.165201>
11. Tunneling spectroscopy of close-spaced dangling-bond pairs in Si(001):H / M. Englund, R. Zuzak, S. Godlewski [et al.] // *Scientific Reports*. – 2015. – Vol. 5. – Art. 14496. <https://doi.org/10.1038/srep14496>
12. Tip-induced band bending on Sr/Si(100)-2×3 reconstructed surface / W. Du, B. Wang, J. Yang [et al.] // *AIP Advances*. – 2017. – Vol. 7. – Art. 125124. <https://doi.org/10.1063/1.4998918>
13. Emergence of very broad infrared absorption band by hyperdoping of silicon with chalcogens / I. Umezu, J. M. Warrender, S. Charnvanichborikarn [et al.] // *Journal of Applied Physics*. – 2013. – Vol. 113, N 21. – Art. 213501. <https://doi.org/10.1063/1.4804935>

14. Experimental study and modeling of silicon supersaturated with selenium by ion implantation and nanosecond-laser melting / F. F. Komarov, G. Ivlev, G. Zayats [et al.] // *Acta Physica Polonica*. – 2019. – Vol. 136, N 2. – P. 254–259. <https://doi.org/10.12693/aphyspola.136.254>

References

1. Limaye M. V., Chen S. C., Lee C. Y., Chen L. Y., Singh S. B., Shao Y. C., Wang Y. F., Hsieh S. H., Hsueh H. C., Chiou J. W., Chen C. H., Jang L. Y., Cheng C. L., Pong W. F., Hu Y. F. Understanding of sub-band gap absorption of femtosecond-laser sulfur hyperdoped silicon using synchrotron-based techniques. *Scientific Reports*, 2015, vol. 5, art. 11466. <https://doi.org/10.1038/srep11466>
2. Franta B., Pastor D., Gandhi H. H., Rekemeyer P. H., Gradečak S., Aziz M. J., Mazur E. Simultaneous high crystallinity and sub-bandgap optical absorbance in hyperdoped black silicon using nanosecond laser annealing. *Journal of Applied Physics*, 2015, vol. 118, no. 22, art. 225303. <https://doi.org/10.1063/1.4937149>
3. Sher M.-J., Lin Y.-T., Winkler M. T., Mazur E., Pruner C., Asenbaum A. Mid-infrared absorbance of silicon hyperdoped with chalcogen via fs-laser irradiation. *Journal of Applied Physics*, 2015, vol. 113, no. 8, art. 063520. <https://doi.org/10.1063/1.4790808>
4. Wang K.-F., Shao H., Liu K., Qu S., Wang Y., Wang Z. Possible atomic structures responsible for the sub-bandgap absorption of chalcogen-hyperdoped silicon. *Applied Physics Letters*, 2015, vol. 107, no. 11, art. 112106. <https://doi.org/10.1063/1.4931091>
5. Mayer M. *SIMNRA User's Guide*. Garching, 1997. 62 p.
6. Feldman L. C., Mayer W., Picraux S. T. *Materials Analysis by Ion Channeling: Submicron Crystallography*. New York, 1982. 300 p.
7. Mott N. F. Metal-insulator transition. *Contemporary Physics*, 1973, vol. 14, no. 5, pp. 401–413. <https://doi.org/10.1080/00107517308210764>
8. Schubert E. F. *Doping III–V Semiconductors*. Cambridge, 1993. 354 p. <https://doi.org/10.1017/cbo9780511599828>
9. Janzén E., Stedman R., Grossmann G., Grimmeiss H. G. High-resolution studies of sulfur- and selenium-related donor centers in silicon. *Physical Review B*, 1984, vol. 29, no. 4, art. 1907. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.29.1907>
10. Sánchez K., Aguilera I., Palacios P., Wahnón P. Formation of a reliable intermediate band in Si heavily coimplanted with chalcogens (S, Se, Te) and group III elements (B, Al). *Physical Review B*. 2010, vol. 82, no. 16, art. 165201. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.165201>
11. Englund M., Zuzak R., Godlewski S., Kolmer M., Frederiksen T., García-Lekue A., Sánchez-Portal D., Szymonski M. Tunneling spectroscopy of close-spaced dangling-bond pairs in Si(001):H. *Scientific Reports*, 2015, vol. 5, art. 14496. <https://doi.org/10.1038/srep14496>
12. Du W., Wang B., Yang J., Zhang K., Zhao Y., Xiong C., Ma J., Chen L., Zhu X. Tip-induced band bending on Sr/Si(100)-2×3 reconstructed surface. *AIP Advances*, 2017, vol. 7, art. 125124. <https://doi.org/10.1063/1.4998918>
13. Umezu I., Warrender J. M., Charnvanichborikarn S., Kohno A., Williams J. S., Tabbal M., Papazoglou D. G., Zhang X.-C., Aziz M. J. Emergence of very broad infrared absorption band by hyperdoping of silicon with chalcogens. *Journal of Applied Physics*, 2013, vol. 113, no. 21, art. 213501. <https://doi.org/10.1063/1.4804935>
14. Komarov F. F., Ivlev G., Zayats G., Komarov A., Nechaev N., Parkhomenko I., Vlasukova L., Wendler E., Miskiewicz S. Experimental study and modeling of silicon supersaturated with selenium by ion implantation and nanosecond-laser melting. *Acta Physica Polonica*, 2019, vol. 136, no. 2, pp. 254–259. <https://doi.org/10.12693/aphyspola.136.254>

Информация об авторах

Ковальчук Наталья Станиславовна – канд. техн. наук, заместитель главного инженера. E-mail: nkovalchuk@integral.by

Комаров Фадей Фадеевич – академик, д-р физ.-мат. наук, профессор, заведующий лабораторией. E-mail: komarovf@bsu.by. ORCID: 0000-0001-8292-8942.

Пархоменко Ирина Николаевна – канд. физ.-мат. наук, вед. науч. сотрудник. E-mail: parhomir@yandex.by. ORCID: 0000-0003-0982-3938.

Гофэн Ян – д-р наук, профессор. E-mail: gfyang@jiangnan.edu.cn. ORCID: 0000-0002-0225-2936.

Мильчанин Олег Владимирович – ст. науч. сотрудник. E-mail: milchanin@tut.by. ORCID: 0000-0002-8300-1070.

Information about the authors

Kovalchuk Natalia S. – Ph. D. (Engineering), Deputy Chief Engineer. E-mail: nkovalchuk@integral.by

Komarov Fadei F. – Academician, D. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Head of the Laboratory. E-mail: komarovf@bsu.by. ORCID: 0000-0001-8292-8942.

Parkhomenko Irina N. – Ph. D. (Physics and Mathematics), Leading Researcher. E-mail: parhomir@yandex.by. ORCID: 0000-0003-0982-3938.

Guofeng Yang – D. Sc., Professor. E-mail: gfyang@jiangnan.edu.cn. ORCID: 0000-0002-0225-2936.

Milchanin Oleg V. – Senior Researcher. E-mail: milchanin@tut.by. ORCID: 0000-0002-8300-1070.