Оптические свойства Si и SiGe нанокристаллов – моделирование и эксперимент

Герт А.В.¹, Авдеев И.Д.¹, Белолипецкий А.В.¹, Нестоклон М.О.¹, Ясиевич И.Н.¹,
 Nguyen Huy Viet², Tran Van Quang³, Ngo Ngoc Ha⁴

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе, 194021, С.-Петербург

²Institute of Physics, Vietnam Academy of Science and Technology, Hanoi, Vietnam

³University of Transport and Telecommunications, Hanoi, Vietnam

⁴Hanoi University of Science and Technology, Hanoi, Vietnam

DOI 10.34077/Semicond2019-260

Большинство устройств современной микроэлектроники построены на базе кремниевой технологии. Среди массы достоинств у этого материала есть недостаток, который затрудняет его использование в устройствах оптоэлектроники, а именно, непрямозонность. Нанокристаллы на основе кремния и германия достаточно исследованы и, хотя их использование позволяет существенно улучшить оптические свойства, потенциал их применения ограничен. В то же время, недавно начались исследования более перспективных нанокристаллов на основе твёрдых растворов SiGe, которые обладают рядом преимуществ по сравнению с чисто кремниевыми наноструктурами.

В работе представлен новый метод получения многослойных периодических структур, в которых слои кремний-германиевого сплава отделены друг от друга слоями аморфного диоксида кремния. Были получены серии образцов многослойных периодических структур SiGe/SiO₂ с разной толщиной сплава SiGe и концентрацией германия в нём. Во всех образцах толщина слоев SiO₂ составляла 3 нм. Толщина слоя сплава кремний-германий для разных структур была 3 и 5 нм. Число бислоев SiGe/SiO₂ менялось от одного до 15.

Теоретическое моделирование состояний электронов и дырок, локализованных в кремниевых и кремний-германиевых нанокристаллах проводилось на основе эмпирического метода сильной связи. Для учёта возможности туннелирования электронов и дырок аморфная матрица SiO₂ рассматривалась как виртуальный кристалл с зонной структурой, подобной зонной структуре β-кristобалита. В результате расчёта была получена зависимость ширины запрещённой зоны и энергий нижних уровней размерного квантования электронов от состава раствора Si_{1-x}Ge_x для нанокристаллов с диаметрами от 2 до 6.5 нм, см. Рис.1. Область, выделенная цветом, соответствует

Рис.1. – Зависимость ширины запрещенной зоны от состава раствора Si_{1-x}Ge_x.

тем нанокристаллам, в которых нижний уровень зоны проводимости лежит в окрестности точки L зоны Бриллюэна. Разработанный метод позволяет наглядно увидеть на какое расстояние волновые функции электронов и дырок проникают в матрицу за границы нанокристаллов за счёт туннелирования. Расчёт позволил выделить интервалы энергий, где возможны прямые оптические переходы между электронными и дырочными состояниями. Также для нанокристаллов кремния и германия-кремния были выполнены вычисления сечения оптического поглощения. Результаты вычислений согласуются с экспериментальными данными [PRB 93, 161413 (2016)].

[1] А.В. Герт, М.О. Нестоклон, А.А. Прокофьев, И.Н. Ясиевич, ФТП, 51, 1325 (2017).

[2] A.V. Belolipetskiy, M.O. Nestoklon, I.N. Yassievich, N. H. Viet, T. V. Quang, N. N. Ha, XXIII International Symposium "Nanophysics and Nanoelectronics" (N. Novgorod, 11-14 March 2019).

[3] A. V. Belolipetsky, M. O. Nestoklon, I. N. Yassievich, <https://arxiv.org/abs/1901.04271> (2019).