Природа фотовозбуждения кремниевых нанокристаллов пассивированных бутилом

Николаев В.В.¹, Калитеевский М.А.^{1,2,3}, Аверкиев Н.С.¹

¹ ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, 194021, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

² СПбАУ РАН, 194021, Санкт-Петербург, ул. Хлопина, дом 8/3

³ Университет ИТМО, 197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., д. 49

DOI 10.34077/Semicond2019-261

В отличие от объемного кристаллического кремния нанокристаллы (НК) кремния способны сравнительно эффективно излучать свет даже при комнатной температуре. Прогресс в методах изготовления коллоидных НК кремния и их пассивации различными лигандами открывает возможности для применения данного материала в оптоэлектронике и, благодаря нетоксичности, в медицине.

Многочисленные исследования последних лет показывают, что характеристики излучения кремниевых НК находятся в качественной зависимости не только от их среднего геометрического размера, но и от химического окружения кристаллических ядер. Это дает почву для активной дискуссии о соотношении вкладов эффекта размерного квантования и влияния поверхности на радиационные переходы в кремниевых НК.

Рис.1. – (а) Полное и фотовозбужденные распределения НК по размерам. (б) Теоретические (штриховые линии) и экспериментальные [2] спектры фотолюминесценции.

Цель данной работы пролить свет на процесс оптического возбуждения неоднородных массивов коллоидных нанокристаллов кремния пассивированных н-бутилом и природу квантовых состояний, порождающих излучение. Разработана феноменологическая теория учитывающая размерную неоднородность массива НК [1] (см. Рис. 1(а)) и селективное воздействие оптического источника на данный массив; получены аналитические выражения для формы пика фотолюминесценции (ФЛ). Разработанный метод был применен для моделирования экспериментальных спектров ФЛ из работы [2] полученных на массиве бутил-пассивированных кремниевых НК при различных энергиях фотона накачки; удалось добиться отличного согласия с экспериментом, Рис. 1(б), и извлечь приближения к зависимости энергии основного и возбужденных оптических переходов от размера. Визуализировано последовательное заполнение неоднородного массива НК фотовозбужденными экситонами, Рис. 1(а).

Проведенный анализ объясняет экспериментально наблюдаемые сдвиг люминесценции от красной до ультрафиолетовой части спектра и двукратное уширение пика при уменьшении длины волны фотовозбуждения. Качественная причина данных эффектов заключается в селективном заполнении размерно-неоднородного массива с уменьшением среднего диаметра излучающих НК.

Рассмотренный механизм основан на гипотезе о том, что положение излучающих и поглощающих оптических переходов определяется квантово-размерным эффектом. Наши результаты являются весомым аргументом в пользу того, что фотолюминесценция бутил-пассивированных кремниевых нанокристаллов рождается вследствие рекомбинации экситонов кристаллического ядра, тогда как поверхностные состояния и дефекты играют второстепенную роль.

[1] V.V. Nikolaev, N.S. Averkiev and M. Fujii, *Appl. Phys. Lett.*, **108**, 153107 (2016).

[2] K. Dohnalova et al., *Light: Science & Applications*, **2**, e47 (2013).