

PACS numbers: 71.20.Mq, 71.23.Cq, 71.35.-y, 73.20.Mf, 73.21.Fg, 73.22.Lp, 78.67.Bf

## Розрахунок зонного моделю нанокристалічного кремнію

В. М. Коваль

*Національний технічний університет України  
«Київський політехнічний інститут»,  
просп. Перемоги, 37,  
03056 Київ, Україна*

В даній роботі виконано кількісну аналіз енергетичного спектру кремнієвого нанокристаліта у вакуумі та аморфному матеріалі, а також враховано вплив перехідного шару на межі поділу кристаліт–матриця. На основі теоретичних розрахунків запропоновано зонний модель нанокремнію. Показано, що завдяки варизонній енергетичній будові даний матеріал може використовуватися для побудови ефективних фотоприймачів.

In a given work, the quantitative analysis of energy spectrum of silicon nanocrystallite in a vacuum and in amorphous material is realized. Influence of intermediate layer on the boundary between crystallite and matrix is taken into consideration. On the basis of theoretical calculations, the band model of nanosilicon is proposed. As shown, this material can be used to design effective photodetectors because of its variable-gap energy structure.

В данной работе проведен количественный анализ энергетического спектра кремниевого нанокристаллита в вакууме и аморфном материале, а также учтено влияние переходного слоя на границе кристаллит–матрица. На основе теоретических расчетов предложена зонная модель нанокремния. Показано, что благодаря варизонному энергетическому строению данный материал может использоваться для построения эффективных фотоприемников.

**Ключові слова:** кристаліт, квантова яма, нанокремній, ширина забороненої зони, екситон.

*(Отримано 21 вересня 2009 р.)*

### 1. ВСТУП

Нанокристалічний кремній (*nc*-Si) є одним з найбільш перспектив-

них напівпровідникових матеріалів для наноелектроніки завдяки відносно дешевій та відпрацьованій інтегральній технології, що використовується для його одержання. Плівки *nc-Si* демонструють покращені електричні та фоточутливі характеристики, а леговані рідкісноземельними металами (РЗМ) — ще й люмінесцентні властивості. Однак накопичений експериментальний результат потребує відповідного теоретичного опису.

Очевидно, що вивчення властивостей нового матеріалу необхідно розпочинати з побудови його зонного моделю. Питання розрахунку ширини забороненої зони квантових точок було висвітлено в багатьох роботах, зокрема у роботах [1, 2, 3] був поданий розрахунок енергетичного спектру носіїв заряду в кристалітах CdS, CdSe та CuCl, вирощених у матрицях силікатного скла, а у роботі [4] — Si кристалітів у матриці SiO<sub>2</sub>. Однак всі вони розглядають напівпровідникові кристаліти в діелектричних матрицях. На сьогодні синтезовано і експериментально досліджується нанокристалічний кремній, що представляє собою аморфну кремнійову матрицю, в яку впроваджено кремнійові кристаліти [5, 6, 7]. Даний матеріал суттєво відрізняється від попередніх випадків і представляє собою систему напівпровідниковий кристаліт–напівпровідникова аморфна матриця. У літературі відсутній теоретичний опис такого матеріалу, тому метою даної роботи є заповнити наявну прогалину.

## 2. ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТЕР Si КВАНТОВОЇ ТОЧКИ

Особливість нанокристалічного матеріалу полягає в тому, що це гетерофазний матеріал–суміш аморфного та кристалічного матеріалу, причому розмір кристалічної складової знаходиться в нанометровому діапазоні. Отож, енергетичний модель нанокристалічного матеріалу слід починати будувати саме з енергетичної будови кристалітів, після чого врахувати його в енергетичній будові аморфної плівки.

Залежно від розміру кристаліта його можна розглядати як квантову точку або кристалічну область, що зберігає основні властивості об'ємного матеріалу (впорядкована область).

Таким чином, необхідно розрахувати:

- енергетичний спектр окремо взятого кремнійового кристаліта;
- зонний модель кремнійового кристаліта, що знаходиться в оточенні аморфного кремнію;
- критичний розмір кристаліта для розмежування двох способів опису матеріалу (квантовий та класичний).

Розглянемо спочатку випадок окремо взятого кремнійового кристаліта, що для носіїв заряду представляє собою потенціально яму зі стінками нескінченної висоти.

Однак перед тим, як здійснити цей розрахунок, слід встановити, які частинки рухаються в квантовій точці: електрон, дірка, екситон. В основі розмежування характеру квантування лежить відомий модель Ал. Ефроса та А. Ефроса [8], що базується на співвідношеннях трьох довжин — радіуса кристаліта ( $a$ ), Борового радіуса електрона ( $a_{B_e}$ ) та Борового радіуса дірки ( $a_{B_h}$ ):

— випадок сильного розмірного квантування ( $a \ll a_{B_e}, a_{B_h}$ ), коли віддаль між рівнями розмірного квантування для електрона та дірки є більшою, ніж енергія їх Кульонової взаємодії; в цьому випадку розглядають окремо квантування руху електрона та дірки;

— проміжний випадок ( $a_{B_h} < a < a_{B_e}$ ), коли для електрона Кульоновою взаємодією можна знехтувати, а для дірки — ні; рух дірки розглядається як рух в усередненому електронному потенціалі;

— випадок слабого розмірного квантування ( $a \gg a_{B_e}, a_{B_h}$ ); в такому разі найбільшою енергією є енергія зв'язку екситона, тому розглядають розмірне квантування руху екситона як цілого.

Оскільки для даної системи відмінність в ефективних масах, а, отже, і в Борових радіусах електрона та дірки невелика, то другу область виділяти недоцільно. Тому можна скористатись спрощеним варіантом розмежування умов квантування: якщо  $a < a_{B_{ex}}$ , то рух електрона та дірки квантується окремо, у протилежному випадку — екситона як цілого. Борів радіус екситона було розраховано за формулою (1) [9]:

$$a_{B_{ex}} = \frac{4\pi\epsilon\epsilon_0\hbar^2}{\mu_{ex}^*q^2}, \quad (1)$$

де  $a_{B_{ex}}$  — Борів радіус екситона;  $\epsilon$  — відносна діелектрична проникність середовища;  $\epsilon_0$  — електрична стала;  $\hbar$  — Діракова стала;  $q$  — заряд електрона;  $\mu_{ex}^*$  — зведена ефективна маса екситона, що визначається як  $\mu_{ex}^* = \frac{m_e^*m_h^*}{m_e^* + m_h^*}$ , де  $m_e^*$  — ефективна маса електрона,  $m_h^*$  — ефективна маса дірки.

Для кремнієвих кристалітів  $a_{B_{ex}}$  становить 4,2 нм. Отже, кристаліти розміром в декілька нм (але менші, ніж 4 нм) є кристалітами малого радіуса, в протилежному випадку — кристалітами великого радіуса.

У більшості експериментальних досліджень нанокристалічного кремнію було встановлено, що форма кремнієвого кристаліта є

близькою до сферичної, і тому розрахунок слід проводити для сферично симетричної прямокутної потенціальної ями. Скористаємось відомим розв'язком Шредингера рівняння для цього випадку [10]:

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2 \Phi_{nl}^2}{2ma^2}, \quad (2)$$

де  $E_{nl}$  — енергетичний рівень носія заряду;  $\Phi_{nl}$  — корні сферичної Бесселевої функції  $l$ -ого порядку,  $n$  та  $l$  — головне та орбітальне квантове число;  $m$  — маса частинки;  $a$  — ширина потенціальної ями.

За формулою (2) було розраховано спектри носіїв заряду в кристалітах малого радіуса для різних розмірів квантової ями, звідки можна оцінити величину розширення забороненої зони кристаліта порівняно з її величиною в об'ємному матеріалі. Так, при зменшенні розміру кристаліта від 4 нм до 1 нм ширина забороненої зони змінюється від 1,27 еВ до 3,56 еВ, в той час як для монокристалічного кремнію ця величина становить всього 1,12 еВ (табл. 1).

Розглянемо випадок слабкого розмірного квантування, коли найбільшою енергією є енергія зв'язку екситона.

Для об'ємного монокристалу розв'язок стаціонарного Шредингера рівняння дає спектр екситона у такому вигляді [11]:

$$E_n(\mathbf{k}) = E_g - \frac{R_{ex}}{n^2} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_{ex}^*}, \quad (3)$$

де  $R_{ex}$  — екситонний Ридберг, що визначається виразом

$$R_{ex} = \frac{\mu_{ex}^* q^4}{32\pi^2 \hbar^2 \epsilon_0^2 \epsilon^2}; \quad \mathbf{k} — \text{хвильовий вектор; } m_{ex}^* — \text{ефективна маса ек-}$$

ситона, що визначається виразом:  $m_{ex}^* = m_e^* + m_h^*$ .

У виразі (3) другий член представляє собою енергію зв'язку екситона, що виявляється квантованою величиною, а третій — його кінетичною енергією. В напівпровідниках при  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  спектр екситона представляє собою серію рівнів воднеподібного атому, що розташована у забороненій зоні під дном зони провідності. Стан з  $n = 1$  є основним станом екситона, і для монокристалічного Si ця величина складає 15 меВ.

Для квантової точки енергетичний спектр екситона розраховується за формулою [11]:

$$E_{nl}(a) = E_g - R_{ex} + \frac{\hbar^2 \Phi_{nl}^2}{2m_{ex}^* a^2}. \quad (4)$$

З виразу (4) видно, що при переході до нанометрового діапазону

розмірів тіла квантованою величиною виявляється кінетична енергія екситона, а енергія його зв'язку — величина стала.

Перехід від об'ємного матеріалу до нанокристалічного супроводжується зсувом екситонних рівнів. При цьому величина екситонного зсуву основного стану екситона визначається розміром кристаліта і може бути розрахована за формулою:

$$\Delta E_{ex} \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_{ex}^* a^2}. \quad (5)$$

З розрахунків видно, що при зменшенні радіуса квантової точки від 30 до 5 нм ця величина зростає від 0,7 до 24 меВ.

### 3. ЗОННИЙ МОДЕЛЬ НАНОКРИСТАЛІЧНОГО КРЕМНІЮ

Попередній випадок нескінченно глибокої потенціальної ями є грубим наближенням для даного матеріалу. Потенціальна яма у першому наближенні вважається нескінченною, якщо її глибина досягає декількох еВ, що спостерігається для діелектричної матриці з напівпровідниковими кристалітами. Оскільки в даній роботі розглядається матеріал з напівпровідниковою матрицею, то слід розглянути випадок потенціальної ями зі стінками кінцевої висоти, щоб наблизити розрахований енергетичний спектр матеріалу до спостережуваного на практиці.

Для того, щоб встановити висоту стінок потенціальної ями, пропонується розглянути утворення гетеропереходу *nc-Si/α-Si* на межі поділу кристаліт–матриця.

Оскільки і кристаліт, і матриця є складовими частинами одного і того ж матеріалу плівки, то, очевидно, вони матимуть однаковий тип провідності. В даній роботі розглядатиметься випадок *n-n*-ізотипного гетеропереходу, оскільки одержані нами плівки мали електронний тип провідності. Параметри, що використані для побудови даного моделю, подані у табл. 1.

Величина розриву зони провідності та валетної зони в даному гетеропереході розраховувалась за формулами (6) та (7) [12] і становить 0,15 та 0,43 еВ відповідно:

$$\Delta E_c = |\chi_1 - \chi_2|, \quad (6)$$

$$\Delta E_v = |\Delta E_{g1} - \Delta E_{g2}| - |\chi_1 - \chi_2|, \quad (7)$$

де  $\Delta E_c$  — розрив зони провідності;  $\Delta E_p$  — розрив валетної зони;  $\chi_1$ ,  $\chi_2$  — енергії спорідненості до електрона *nc-Si* та *α-Si* відповідно;  $\Delta E_{g1}$ ,  $\Delta E_{g2}$  — ширина забороненої зони *nc-Si* та *α-Si* відповідно.

Оскільки концентрація донорів у плівці є невідомою величиною, то для розрахунку було взято можливий діапазон її значень і відпо-

**ТАБЛИЦЯ 1.** Вихідні параметри моделю гетеропереходу *c*-Si/ $\alpha$ -Si на межі поділу кристаліт–матриця.

Параметер	<i>c</i> -Si	$\alpha$ -Si
$\Delta E_g$ , eВ	1,12	1,7
$N_D$ , см <sup>-3</sup>	10 <sup>15</sup>	10 <sup>15</sup> –10 <sup>20</sup>
$n_i$ , см <sup>-3</sup>	1,6·10 <sup>10</sup>	1,6·10 <sup>10</sup>
$\phi$ , eВ	4,32	—
$\chi$ , eВ	4,05	3,9
$\epsilon$	12	11,88

**ТАБЛИЦЯ 2.** Розраховані параметри моделю гетеропереходу *c*-Si/ $\alpha$ -Si на межі поділу кристаліт–матриця.

$N_{D2}$ , см <sup>-3</sup>	10 <sup>15</sup>	10 <sup>16</sup>	10 <sup>17</sup>	10 <sup>18</sup>	10 <sup>19</sup>	10 <sup>20</sup>
$\phi_2$ , eВ	4,47	4,42	4,36	4,3	4,24	4,19
$V_D$ , eВ	0,154	0,096	0,039	0,019	0,076	0,134
$V_{D1}$ , eВ	0,077	0,088	0,038	0,019	0,076	0,134
$V_{D2}$ , eВ	0,077	0,009	4·10 <sup>-4</sup>	2·10 <sup>-5</sup>	8·10 <sup>-6</sup>	10 <sup>-6</sup>
$U_e$ , eВ	0,3	0,25	0,19	0,15	0,15	0,15
$U_h$ , eВ	0,43	0,43	0,43	0,45	0,51	0,56
$a$ , нм	$\Delta E_g$ , eВ					
1	—	—	—	—	—	—
1,5	1,61	1,59	1,54	—	—	—
2	1,46	1,448	1,428	1,412	1,416	1,419
2,5	1,37	1,36	1,35	1,34	1,34	1,34
3	1,304	1,3	1,293	1,286	1,288	1,289
3,5	1,26	1,26	1,26	1,25	1,25	1,25
4	1,23	1,23	1,23	1,23	1,23	1,23

відно розраховані величини роботи виходу за формулою (8):

$$\phi = \chi + \frac{\Delta E_g}{2} - \Psi_B, \quad (8)$$

де  $\Psi_B = kT \ln \frac{N_D}{n_i}$ .

Вигин зон по обидва боки гетеропереходу можна визначити із співвідношень (9) та (10) [13]:

$$V_D = V_{D1} + V_{D2} = |\phi_1 - \phi_2|, \quad (9)$$

$$\frac{V_{D1}}{V_{D2}} = \frac{N_{D2}\epsilon_2}{N_{D1}\epsilon_1}, \quad (10)$$

де  $V_D$  — сумарний вигин зон;  $V_{D1}, V_{D2}$  — вигин зон зі сторони  $nc$ -Si та  $\alpha$ -Si відповідно;  $\phi_1, \phi_2$  — робота виходу з  $nc$ -Si та  $\alpha$ -Si відповідно;  $N_{D1}, N_{D2}$  — концентрація донорів  $nc$ -Si та  $\alpha$ -Si відповідно;  $\epsilon_1, \epsilon_2$  — відносна діелектрична проникність  $nc$ -Si та  $\alpha$ -Si відповідно.

Результати розрахунків подано у табл. 2. З наведених даних видно, що для даного гетеропереходу незалежно від рівня легування аморфного кремнію виконуються наступні нерівності:  $\chi_1 > \chi_2$ ;  $\chi_1 + E_{g1} < \chi_2 + E_{g2}$ ;  $V_{D1} \leq \Delta E_c$ .

Згідно з класифікацією енергетичних профілів гетеропереходів [13], для даної системи залежно від співвідношення робіт виходу  $nc$ -Si та  $\alpha$ -Si можливими є два наступні профілі енергетичних зон (рис. 1).

З рисунку 1 можна визначити висоту потенціального бар'єру для електронів та дірок для двох випадків:

$$\begin{aligned} \phi_1 > \phi_2 : U_e &= \Delta E_c, U_h = \Delta E_v + V_{D1} + V_{D2}, \\ \phi_1 < \phi_2 : U_e &= \Delta E_c + V_{D1} + V_{D2}, U_h = \Delta E_v, \end{aligned}$$

де  $U_e, U_h$  — висота потенціального бар'єру для електронів та дірок відповідно.

Визначення положення енергетичних рівнів носіїв заряду в потенціальній ямі кінцевої висоти пов'язане з більшими математичними труднощами, аніж випадок потенціальної ями зі стінками нескінченної висоти. Оскільки для визначення ширини забороненої зони матеріалу досить знайти положення основного енергетичного рівня електрона та дірки, то скористаємось відомим розв'язком Шредингера рівняння для випадку  $l = 0$  [14]:

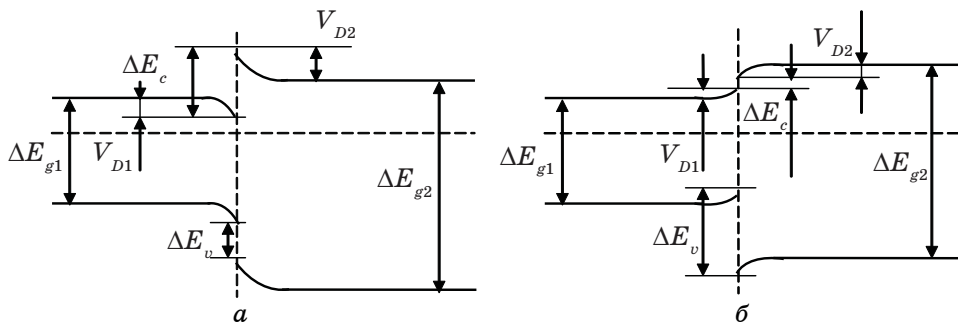


Рис. 1. Рівноважні профілі енергетичних зон  $nc$ -Si/ $\alpha$ -Si-гетеропереходу за умови: а)  $\phi_1 > \phi_2$ ; б)  $\phi_1 < \phi_2$ .

$$\sin ka = \pm \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0 a^2}} ka, \quad (11)$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - |E|)}, \quad (12)$$

$$\operatorname{ctg} \kappa a < 0. \quad (13)$$

Корні рівняння (11) визначають рівні енергії носія заряду (обираються лише ті розв'язки, які задовольняють умові (13)). Рівняння розв'язувалося за допомогою програми Mathcad Professional.

Результат розрахунку ширини забороненої зони кремнієвого кристаліта, що знаходиться в аморфній кремнієвій матриці, залежно від розміру кристаліта та рівня легування матриці подано у табл. 2.

Для електронів у кристалітах розміром 1 нм при висоті бар'єру 0,15–0,3 еВ немає жодного розв'язку рівняння. Це означає, що у такій потенціальної ямі немає зв'язаних станів (рівнів енергії).

Як видно з наведених у табл. 2 результатів розрахунку, значення ширини забороненої зони кристаліта зазнає незначної зміни з ростом концентрації донорів у аморфному кремнії, і в середньому ця величина становить 1,46 та 1,23 еВ для кристалітів розміром 2 та 4 нм відповідно.

Якщо порівняти одержані результати зі значенням ширини забороненої зони кристалітів у випадку  $U = \infty$ , то можна відзначити, що наявність оточуючого середовища (в даному випадку аморфної матриці) призводить до зменшення енергії основного стану носіїв заряду і, як наслідок, до зменшення  $\Delta E_g$  на 0,3 та 0,1 еВ для кристалітів розміром 2 та 4 нм відповідно.

Визначимо, як зміниться положення основного рівня екситона при кінцевій висоті потенціального бар'єру. Висота потенціального бар'єру для електронно-діркової пари залежно від співвідношення робіт виходу  $n\text{-Si}$  та  $\alpha\text{-Si}$  визначатиметься виразом (14) або (15):

$$\phi_1 > \phi_2 : U_{ex} = \Delta E_c - V_{D1} + R_{ex}, \quad (14)$$

$$\phi_1 < \phi_2 : U_{ex} = \Delta E_c + V_{D1} + V_{D2} + R_{ex}. \quad (15)$$

З рівняння (11) можна визначити положення й основного рівня екситона.

Розраховані значення  $E_{ex0}$  являються по суті екситонним зсувом. Як і у випадку сильного розмірного квантування, для екситонного зсуву спостерігається слабка залежність від концентрації донорів в аморфному кремнії, особливо для кристалітів розміром більшим, ніж 10 нм.



Крім того, аналогічно наявність оточуючого середовища (аморфної матриці) призводить до зменшення енергії екситонного зсуву. Так, для кристалітів розміром 5 нм зсув основного рівня екситона зменшився на 4–10 меВ.

Співставлення теоретичних розрахунків ширини забороненої зони з експериментально одержаними величинами здійснювалось на основі даних спектрів вбирання та структурних аналіз.

Так, згідно з даними атомової силової мікроскопії (АСМ) та про-світлювальної електронної мікроскопії (ПЕМ), плівки нанокристалічного кремнію містять кристаліти двох груп розмірів: 1–5 нм та 20–30 нм. Модельні значення ширини забороненої зони для вказаних розмірів нанокристалітів 1,23–1,61 еВ, що добре узгоджуються з одержаними зі спектрів вбирання значеннями 1,2–1,8 еВ. Максимальне відхилення теоретичних результатів від експериментальних становить 12%.

Однак найбільш поширені значення величини забороненої зони знаходяться у діапазоні 1,5–1,7 еВ, а розрахунки згідно даного моделю не дають розв'язку для величини 1,7 еВ. Така невідповідність може пояснюватись тим, що даний модель є в деякій мірі ідеалізованим, оскільки не враховує межі поділу нанокристаліт–матриця. Насправді поверхня нанокристаліта містить велику кількість обірваних зв'язків — наслідок переходу від кристалічної до аморфної фази. Насичення цих зв'язків здійснюється, очевидно, наявними неконтрольованими або спеціально введеними домішками. В результаті між кристалітом та матрицею виникає перехідний шар, природа якого у випадку нелегованих кремнієвих плівок є близькою до  $\text{SiO}_2$ , а легуваних РЗМ-плівок — до  $\text{RE}_2\text{O}_3$ .

Отже, для розрахунку ширини забороненої зони слід розглянути структуру нанокристаліт–тунельно-тонкий діелектрик–аморфна матриця (*nc-Si/SiO<sub>2</sub>/α-Si* та *nc-Si/RE<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/α-Si*). При розгляді такого переходу різницею роботи виходу з кристалічного та аморфного кремнію, а також вбудованим в діелектрик зарядом можна знехтувати, оскільки їх вплив на величину потенціальної стінки є незначним порівняно з її висотою. Тоді висота бар'єру в квантовій точці визначатиметься лише розривом валентної зони та зони провідності. Прийнявши для  $\text{SiO}_2$  та  $\text{RE}_2\text{O}_3$  величину спорідненості до електрону рівною 0,9 та 0,5 еВ, а також ширину забороненої зони 9 та 5 еВ відповідно, було розраховано висоту потенціального бар'єру на межі поділу кристаліт-перехідний шар.

Далі аналогічно до попереднього моделю за рівнянням (11) було визначено ширину забороненої зони матеріалу для обох випадків.

Результати розрахунків зведені у табл. 3, звідки видно, що врахування проміжного шару дає краще узгодження експериментальних та модельних даних, адже у такому випадку з'являються розв'язки для нанокристалітів розміром 1 нм.

**ТАБЛИЦЯ 3.** Розраховані значення ширини забороненої зони кристаліту в залежності від найближчого оточення.

$a$ , нм	$\Delta E_g$ , eВ			
	$U_\infty$	SiO <sub>2</sub>	RE <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	$a$ -Si
1	3,56	2,83	2,42	—
1,5	2,2	1,91	1,83	—
2	1,73	1,63	1,56	1,42—1,46
2,5	1,51	1,48	1,42	1,34—1,37
3	1,39	1,36	1,34	1,29—1,3
3,5	1,32	1,3	1,29	1,25—1,26
4	1,27	1,26	1,25	1,23

#### 4. РОЗМЕЖУВАННЯ КВАНТОВОГО ТА КЛАСИЧНОГО СПОСОБУ ОПИСУ МАТЕРІЯЛУ

Головною умовою спостереження квантово-розмірного ефекту є зменшення розміру кристаліта до нанометрового діапазону. Тому критерієм розмежування квантового та класичного способу опису матеріялу є радіус кристаліта.

Верхня межа для розміру кристаліта обирається з тієї умови, що віддаль між енергетичними рівнями має значно перевищувати теплову енергію носіїв заряду, інакше однакова заселеність цих рівнів зробить квантові ефекти практично неспостережуваними.

Для квантових точок умова, за якої заселенням вищих рівнів можна знехтувати, записується у вигляді [15]:

$$\frac{1}{3}(E_{n+1} - E_n) \geq kT. \quad (16)$$

Звідси для електрона та дірки максимальний розмір, при якому квантові енергетичні рівні є розрізненими, становить 5 та 4 нм відповідно.

Таким чином, зонна будова нанокристалічного кремнію залежно від розміру кристаліта може бути представлена в такому вигляді:

—  $a < 1$  нм, електронні енергетичні рівні не з'являються у квантовій точці;

—  $1 < a < 5$  нм, нанокристалічний матеріял представляє собою аморфну матрицю з квантовими точками малого радіуса, при цьому у спектрах власного вбирання спостерігається зсув краю власного вбирання у високоенергетичну частину спектру по відношенню до  $c$ -Si і сходинок, пов'язані з більш високоенергетичними переходами між квантовими рівнями; екситонна смуга вбирання не спо-

стерігається, оскільки розмір кристаліта є меншим Борового радіуса екситона;

—  $5 < a < 20$  нм нанокристалічний матеріал представляє собою аморфну матрицю з квантовими точками великого радіуса, при цьому на краю власного вбирання спостерігається серія екситонних піків, для яких характерний зсув у високоенергетичну частину спектру; переходи між квантовими рівнями стають непомітними, однак основний рівень носіїв заряду ще буде знаходитись вище краю відповідної дозволеної зони, тому спостерігатиметься незначне розширення ширини забороненої зони;

—  $a > 20$  нм нанокристалічний матеріал представляє собою аморфну матрицю з кремнійовими кристалітами зі звичайною шириною забороненої зони, при цьому у спектрах вбирання край власного вбирання не зазнає змін; в даній області розмірів кристаліти слід розглядати просто як області впорядкування аморфної матриці.

Отже, нанокристалічний кремній у цілому представляє собою варизонний матеріал, що зумовлює більш ефективне вбирання оптичного випромінення: аморфна матриця вбирає видиме червоне випромінення, а кристаліти — видиме випромінення від блакитного до червоного при розмірі кристалітів у декілька нм або ближнє ІЧ-випромінення при розмірі кристалітів 20–30 нм.

## 5. ВИСНОВКИ

Запропонований в даній роботі модель дав змогу описати енергетичну будову нанокристалічного матеріалу залежно від розміру кристалітів. Розраховані значення ширини забороненої зони добре корелюють з визначеними по експериментальним спектрам вбирання.

На основі даного моделю у подальшому планується здійснити теоретичний опис електричних та оптичних властивостей нанокристалічного кремнію.

## ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. А. И. Екимов, А. А. Онущенко, *Письма в ЖЭТФ*, **40**, № 8: 337 (1984).
2. С. І. Покутній, *УФЖ*, **42**, № 1: 111 (1997).
3. А. И. Екимов, А. А. Онущенко, *ФТП*, **16**, № 7: 1215 (1982).
4. И. М. Купчак, Д. В. Корбутяк, Ю. В. Крюченко, *ФТП*, **40**, № 1: 98 (2006).
5. А. Б. Певцов, А. Н. Феоктистов, *Письма в ЖТФ*, **28**, № 7: 89 (2002).
6. C. Goncalves, S. Charvet, and A. Zeinert, *Thin Solid Films*, **403–404**: 91 (2002).
7. H. Aguas, L. Raniero, and L. Pereira, *J. Non-Cryst. Solids*, **338–340**: 183 (2004).
8. Ал. Л. Эфрос, А. Л. Эфрос, *ФТП*, **16**, № 7: 1209 (1982).
9. В. П. Драгунов, И. Г. Неизвестный, В. А. Гридчин, *Основы нанoeлектрони-*

- ки (Москва: Логос: 2006).
10. А. С. Давыдов, *Квантовая механика* (Москва: Советское радио: 1963).
  11. С. И. Покутний, *Теория экситонов в квазиульмерных полупроводниковых системах* (Одесса: Астропринт: 2003).
  12. А. Милнс, Д. Фойхт, *Гетеропереходы и переходы металл — полупроводник* (Москва: Мир: 1975); A. G. Milnes and D. L. Feucht, *Heterojunctions and Metal-Semiconductor Junctions* (New York-London: Academic Press: 1972).
  13. Б. Л. Шарма, Р. К. Пурохит, *Полупроводниковые гетеропереходы* (Москва: Советское радио: 1979); B. L. Sharma and R. K. Purohit, *Semiconductor Heterojunctions* (Oxford : Pergamon Press: 1974).
  14. В. Г. Левич, Ю. А. Вдовин, В. А. Мямлин, *Курс теоретической физики* (Москва: Наука: 1971).
  15. Н. Н. Герасименко, Ю. Н. Пархоменко, *Кремний — материал наноэлектроники* (Москва: Техносфера: 2007).