

На правах рукописи

БЕЛЯКОВ ВЛАДИМИР АЛЕКСЕЕВИЧ

**ТЕОРИЯ МЕЖЗОННОЙ ИЗЛУЧАТЕЛЬНОЙ
РЕКОМБИНАЦИИ В КРЕМНИЕВЫХ НАНОКРИСТАЛЛАХ,
ЛЕГИРОВАННЫХ МЕЛКИМИ ПРИМЕСЯМИ**

(01.04.07 – физика конденсированного состояния)

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Нижний Новгород – 2008 г.

Работа выполнена на кафедре теоретической физики физического факультета ГОУ ВПО «Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»

Научный руководитель кандидат физико-математических наук,
Бурдов Владимир Анатольевич

Официальные оппоненты доктор физико-математических наук
Маргулис Виктор Александрович

кандидат физико-математических наук
Данилов Юрий Александрович

Ведущая организация Институт физики микроструктур Российской Академии Наук

Защита состоится 24 сентября 2008 г. в ___ часов на заседании диссертационного совета Д212.166.01 при государственном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского» по адресу: 603950, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, д. 23, корп. 3 (НИФТИ).

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского.

августа

Автореферат разослан «20» августа 2008 г. Отзывы направлять по адресу: 603950, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, д. 23, корп. 3, физический факультет ННГУ

Ученый секретарь диссертационного совета

доктор физико-математических наук,

профессор

А.И. Машин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы

Хорошо известно, что кремний является основным элементом современной микроэлектроники. Возможность высокой очистки кремния, его доступность и дешевизна, высокие качества границы раздела Si/SiO₂ обеспечили кремнию лидирующие позиции в создании различных приборов микроэлектроники и их применении. Тем не менее, в оптоэлектронике, вплоть до настоящего времени кремний не получил широкого распространения. Причиной тому – фундаментальная особенность кремниевой зонной структуры – ее непрямозонность.

Непрямые излучательные переходы, фактически, являются запрещенными в объёмном кремнии, потому что при переходе электрона из энергетического минимума зоны проводимости (Δ -точка) в максимум валентной зоны (Γ -точка) излучаемый фотон не может обеспечить выполнение закона сохранения импульса.

Открытие излучения нанокристаллического [1] и пористого [2] кремния в видимом диапазоне в начале 90-х натолкнуло на мысль о возможном «выпрямлении» кремниевой зонной структуры. Посредством формирования кристаллитов размером несколько нанометров (нанокристаллы) в широкозонной диэлектрической матрице, например в SiO₂, создаётся высокий энергетический барьер для носителей внутри нанокристалла (потенциал конфайнмента). Электронное состояние оказывается локализованным внутри нанокристалла и уже не обладает определённым импульсом, вследствие соотношения неопределённости Гейзенберга. Действительно, позднее была обнаружена эффективная фотолюминесценция кремниевых нанокристаллов в видимом диапазоне, причем оказалось возможным даже получить оптическое усиление на нанокристаллах [3].

Однако в целом, как следует заметить, эффективность излучения кремниевых нанокристаллов все равно оставалась низкой по сравнению с прямозонными III-V или II-VI материалами. Таким образом, непрямозонность зонной структуры объемного кремния в определенной степени проявляется и в нанокристаллах, что также затрудняет их использование в оптике. Поэтому проблема внедрения кремния в элементную базу современной оптоэлектроники в качестве основного, или, по крайней мере, широко распространенного компонента, все еще далека от своего решения. Этим обстоятельством вызван предпринимаемый в последнее десятилетие поиск путей какого-либо контролируемого воздействия на электронную структуру нанокристаллов, эффективно «выпрямляющего» энергетические зоны.

В качестве одного из путей модификации оптических свойств кремниевых нанокристаллов, было предложено их легирование мелкими примесями. Было обнаружено, что интенсивность фотолюминесценции возрастала в несколько раз, когда нанокристаллы легировались фосфором [4]. В то же время, при внедрении в нанокристаллы бора [5] усиления не происходило. Природа этого явления дискутируется до сих пор. С большой долей вероятности можно, утверждать лишь то, что за него ответственны различные процессы и механизмы, влияющие как на безызлучательную, так и излучательную рекомбинацию в нанокристаллах. При этом, роль последних пока практически не изучена. Это и составило основную задачу данной диссертационной работы, в которой предполагается исследовать влияние легирования квантовых точек мелкими примесями на излучательную способность кремниевых нанокристаллов.

Цели и задачи работы

Цель работы состоит в теоретическом изучении влияния мелкой примеси (как донорного, так и акцепторного типа), внедрённой в нанокристалл кремния, на его электронную структуру и вероятность излучательных переходов в нанокристалле. В качестве легирующей примеси рассматриваются традиционные для кремния химические элементы – бор и фосфор – являющиеся мелкими акцептором и донором, соответственно. В связи с этим в работе решаются следующие задачи:

1. Определение энергетического спектра и волновых функций электронов в кремниевой квантовой точке с мелким водородоподобным акцептором, находящемся в произвольном положении внутри квантовой точки;
2. Определение энергетического спектра и волновых функций электронов в кремниевой квантовой точке с атомом фосфора с учетом долино-орбитального взаимодействия в зоне проводимости и коррекции «центральной ячейки» в валентной зоне;
3. Расчёт времен излучательной межзонной рекомбинации, идущей, как с участием, так и без участия фононов, в нанокристалле с атомом бора. Анализ зависимости скорости излучательной рекомбинации от размера нанокристалла и положения примесного центра в нем;
4. Расчёт времен излучательной межзонной рекомбинации, обусловленной короткодействующим электрическим полем иона фосфора в нанокристалле. Анализ возможности «выпрямления» зонной структуры нанокристалла.

Научная новизна диссертации

В представленной диссертации построена оригинальная теория примесных состояний и межзонной излучательной рекомбинации в

нанокристаллах кремния, легированных бором и фосфором, в условиях сильного квантового конфайнмента, т.е. в случае, когда эффективный «объемный» боровский радиус становится больше радиуса нанокристалла. В частности:

- Впервые рассчитаны энергетические спектры и волновые функции валентных электронов и электронов проводимости в нанокристаллах кремния с мелким примесным центром при произвольном положении последнего внутри нанокристалла.
- Впервые было показано, что величина расщепления энергетических уровней и химического сдвига в кремниевом кристаллите, обусловленных потенциалом центральной ячейки фосфора, имеет сильную зависимость от размера кристаллита и от положения примеси в нем.
- Были впервые вычислены времена излучательной межзонной рекомбинации в кремниевых кристаллитах с примесью и проанализирована зависимость скорости рекомбинации от размера квантовой точки и величины смещения примеси относительно центра квантовой точки. Показано, что в случае легирования бором, независимо от положения акцептора внутри кристаллита, излучательная рекомбинация не может быть ускорена по сравнению со случаем нелегированного нанокристалла. Напротив, легирование фосфором, при определенных условиях, способно многократно ускорить межзонную излучательную рекомбинацию.

Практическая значимость

Результаты, полученные в данной работе, позволяют понять структуру и симметрию электронных состояний в нанокристаллах кремния, легированных мелкими примесями, что, в свою очередь, служит основанием для формулирования правил отбора при электронно-

дырочных излучательных переходах и анализа возможных путей управления временами этих переходов. Такой анализ может быть полезен при интерпретации результатов экспериментов по фотолюминесценции кремниевых кристаллитов с примесями, а также может использоваться в качестве предсказаний теории по возможности получения нанокристаллов с заданными люминесцентными свойствами.

Основные научные положения, выносимые на защиту

1. Потенциал центральной ячейки фосфора приводит к химическому сдвигу и расщеплению основного состояния в зоне проводимости нанокристалла, аномально сильным по сравнению с их значениями в объемном кремнии.
2. Величина расщепления уровня основного состояния в квантовой точке с примесью и химический сдвиг сильно зависят от положения примеси внутри нанокристалла – они максимальны, когда примесь находится на расстоянии, немного меньшем половины радиуса, от центра нанокристалла.
3. Возможно «управление» каналом излучательной рекомбинации в кремниевых кристаллитах путем их легирования мелкими примесями.
4. При легировании бором время излучательной рекомбинации всегда возрастает по сравнению со случаем «чистого» нанокристалла. В зависимости от положения акцептора, время рекомбинации может увеличиться до двух раз.
5. При легировании фосфором, в случае его центрального положения в нанокристалле, оказывается возможным наибольшее ускорение излучательных межзонных переходов по сравнению со случаем нелегированного нанокристалла. В частности, скорость излучательной рекомбинации возрастает на порядок и более для нанокристаллов с размерами 2 – 3 нм.

Личный вклад автора

Автор участвовал в решении теоретических задач, обсуждении полученных результатов и их интерпретации, а также в написании статей. Все численные расчеты проделаны автором.

Апробация результатов работы

Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на следующих конференциях:

1. Всероссийская конференция «XXII Научные чтения им. академика Н.В. Белова» (Нижний Новгород 2003).
2. VII Международный симпозиум «Нанопотоника» (Нижний Новгород 2003).
3. IV и V Международные конференции «Аморфные и микрокристаллические полупроводники» (С.-Петербург 2004, 2006).
4. X, XI, XII Международные симпозиумы «Нанопотоника и наноэлектроника» (Нижний Новгород 2006, 2007, 2008).
5. 1-я Всероссийская конференция «Физические и физикохимические основы ионной имплантации» (Нижний Новгород 2006).
6. Международная конференция «ODPO-10» (Ростов-на-Дону 2007).
7. VIII Всероссийская конференция по физике полупроводников (Екатеринбург 2007).

Публикации

По материалам диссертации опубликовано 23 научные работы, в том числе 8 статей в реферируемых научных журналах, а также 15 работ в сборниках трудов и тезисов конференций. В журналах, входящих в перечень ВАК РФ, опубликовано 5 статей.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, двух приложений, списка цитированной литературы из 120 наименований и списка работ автора по теме диссертации. Общий объем диссертации составляет 144 страницы, включая, 35 рисунков и 3 таблицы.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **Введении** обоснована актуальность темы исследований, показана её научная новизна и практическая значимость, сформулированы цели работы, представлены сведения о структуре и содержании работы, а также приведены положения, выносимые на защиту.

В первой Главе дан обзор работ, посвящённых основным особенностям фотолюминесценции кремниевых нанокристаллов. В первой части обсуждаются результаты экспериментов по фотолюминесценции кремниевых кристаллитов, в частности: наблюдаемое увеличение оптической щели по сравнению с объемным кремнием; характерные времена излучательной и безызлучательной рекомбинации; изменение интенсивности излучения при легировании. Во второй части проведён анализ существующих на данный момент теоретических работ, касающихся изучения электронной структуры и оптических свойств нанокристаллов кремния. В частности, обсуждаются различные методы расчета электронной структуры кристаллитов, такие как теория функционала плотности [6], метод псевдопотенциала [7], приближение сильной связи [8], а также приближение огибающей (**кр-метод**). Проведено обсуждение работ, посвящённых расчёту скорости излучательной и безызлучательной рекомбинации в нелегированном нанокристалле.

Во второй Главе решена задача определения электронных состояний и энергетического спектра в кремниевом нанокристалле, легированном атомом бора.

В разделе 2.1 изложена методика нахождения электронных состояний в квантовой точке с примесью, которая основана на решении уравнении Шредингера с нулевым граничным условием для огибающей функции. Кулоновский потенциал, действующий на электрон со стороны примесного иона, разделяется на дальнедействующую и короткодействующую части:

$$V_c = V(\mathbf{r}) + W(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где $V(\mathbf{r})$ – дальнедействующая компонента, описывающая макроскопическое кулоновское поле в среде, а $W(\mathbf{r})$ – короткодействующий потенциал, существующий только вблизи ядра примеси на масштабах порядка боровского радиуса. Согласно работе [9], для бора потенциал $W(\mathbf{r})$ можно считать равным нулю, что свидетельствует о том, что бор является водородоподобным акцептором, создающим только дальнедействующее поле $V(\mathbf{r})$. Определён явный вид поля $V(\mathbf{r})$ в нанокристалле, с учётом действия поляризационных зарядов, возникающих на границе квантовой точки. На примере нелегированного нанокристалла продемонстрирован метод расчета энергетического спектра и волновых функций в рамках приближения огибающей.

В разделах 2.2 и 2.3 проведён расчёт электронной структуры в валентной зоне и в зоне проводимости, соответственно, для нанокристалла, легированного атомом бора. Показано, что при центральном положении иона бора основной уровень вырожден двенадцатикратно в зоне проводимости и шестикратно в валентной зоне, а волновые функции основных состояний в обеих зонах имеют

преимущественно огибающие s-типа. При произвольном положении примеси в нанокристалле, вырождение спектра почти полностью снимается (остается лишь двукратное спиновое вырождение), а волновые функции основных состояний приобретают сильные добавки с огибающими p-типа.

В третьей Главе рассмотрены электронные состояния нанокристалла, легированного донорной примесью – фосфором. Основное отличие от предыдущей задачи с водородоподобным акцептором заключается в появлении дополнительного короткодействующего потенциала $W(\mathbf{r})$, который также называют потенциалом центральной ячейки, создаваемого примесью. Показано, что для фосфора в кремнии, когда он является донором замещения,

$$W(r) = -\frac{e^2}{r} \left(A e^{-\alpha r} + (1 - A - 1/\epsilon_s) e^{-\beta r} \right), \quad (2)$$

где константы α и β равны 0.82 и 5.0 обратного боровского радиуса, соответственно, и $A = 1.142$. Очевидно, потенциал центральной ячейки реально отличен от нуля только в элементарной ячейке, содержащей

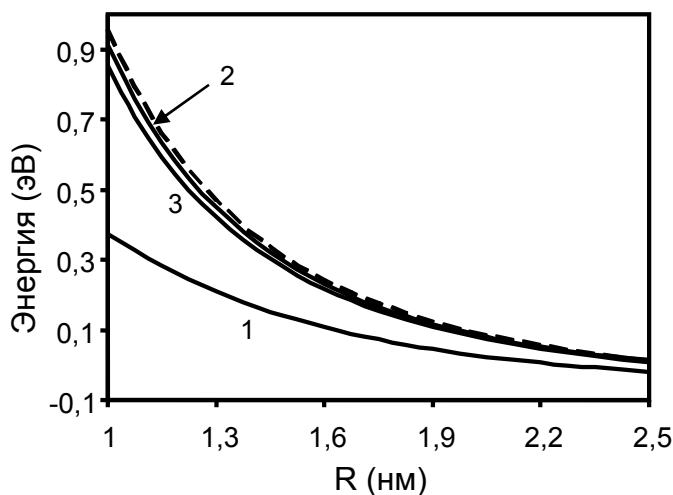


Рис. 1. Энергии синглета (1), дублета (2) и триплета (3) в нанокристалле (ион фосфора – в центре). Штриховая линия – исходный шестикратно вырожденный уровень водородоподобного донора.

донор, поэтому в уравнении для огибающей потенциал центральной ячейки можно заменить δ -функцией Дирака, т.е. рассматривать его как потенциал нулевого радиуса.

Показано (раздел 3.2), что в зоне проводимости короткодействующий потенциал центральной ячейки вызывает долинно-

орбитальное взаимодействие, что приводит к сильному расщеплению нижнего шестикратно вырожденного уровня на синглет, дублет и триплет с симметрией неприводимого представления A_1 , E и T_2 точечной группы T_d (см. рис.1). Причём величина расщепления резко возрастает с уменьшением радиуса нанокристалла R .

В разделе 3.3 рассмотрены электронные состояния ниже оптической щели. Показано, что в валентной зоне потенциал центральной ячейки фосфора не так эффективен и приводит только к небольшим поправкам в энергетическом спектре и волновых функциях.

В четвёртой Главе рассчитано время излучательной рекомбинации τ_R для квантовой точки, содержащей водородоподобный акцептор – бор. На основании расчетов Главы 2, в которой были найдены волновые функции электронов, выполняется вычисление матричных элементов и скоростей излучательных межзонных переходов.

В разделе 4.1 обсуждается процесс фотолюминесценции при различных режимах накачки – импульсном и непрерывном. Показано, что независимо от способа накачки, интенсивность фотолюминесценции всегда зависит от скорости излучательной рекомбинации – ключевого параметра, влияющего на эффективность генерации фотонов.

В разделе 4.2 рассчитана скорость бесфононного излучательного перехода в кремниевом нанокристалле. Для этого используется первый порядок теории возмущений по времени («золотое правило Ферми»). Результаты вычислений показывают, что в исследуемом диапазоне размеров нанокристаллов (2 – 6 нм), легированных водородоподобной примесью (бором), скорость бесфононной рекомбинации оказывается достаточно малой – меньше, чем 10^3 с^{-1} и, как оказывается впоследствии, более чем на два порядка уступает скорости переходов с участием фонона.

В разделе 4.3 рассмотрены излучательные переходы идущие с участием фононов. Скорость таких процессов рассчитывается во втором

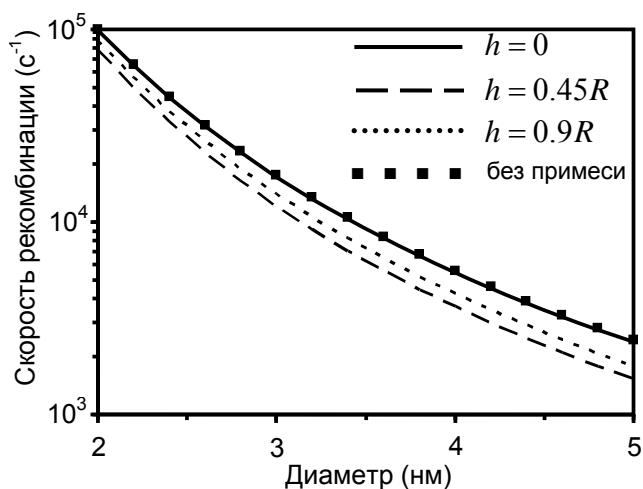


Рис. 2. Скорость излучательной рекомбинации в зависимости от диаметра нанокристалла при различных смещениях акцептора h от центра нанокристалла.

порядке теории возмущений. Взаимодействие электрона с фононом описывается моделью жёстких ионов [10]. На рис. 2 показаны зависимости обратного времени (скорости) излучательной рекомбинации, в квантовой точке, легированной бором, при комнатной температуре и трёх различных значениях

смещения иона бора h от центра квантовой точки. Видно, что при любом смещении акцептора от центра скорость излучательной рекомбинации оказывается меньше, чем в «чистом» нанокристалле. Только в случае центрального положения примеси, вероятности рекомбинации в беспримесном и легированном нанокристаллах практически совпадают.

В пятой Главе рассмотрено излучение в кремниевом нанокристалле, легированном фосфором. В главах 2 и 3 было установлено, что принципиальное отличие фосфора от бора (помимо того, что один из них является донором, а другой акцептором) заключается в том, что ион фосфора порождает в своей малой окрестности сильный короткодействующий потенциал – потенциал центральной ячейки. Это отличие принципиальным образом сказывается на вероятностях межзонных переходов.

В разделе 5.1 показано, что потенциал центральной ячейки способен, подобно фононам, эффективно смешивать блоховские функции Г- и X-точек зоны Бриллюэна. При этом два этих механизма, фактически, не

интерferируют. В результате, полная скорость излучательной рекомбинации в нанокристалле, легированном фосфором, является суммой вкладов этих двух процессов:

$$\tau_R^{-1} = \tau_D^{-1} + \tau_{ph}^{-1}, \quad (3)$$

где τ_D^{-1} – скорость рекомбинации, индуцированной потенциалом центральной ячейки донора, а τ_{ph}^{-1} – скорость рекомбинации с участием фонона.

В разделе 5.2 представлены результаты расчётов времён переходов с участием фононов. Показано, что внедрение атома фосфора в квантовую точку почти всегда уменьшает скорость излучательной рекомбинации, идущей с участием фононов. Только в случае центрального положения примеси для нанокристаллов с радиусом больше 2 нм наблюдается незначительное увеличение τ_{ph}^{-1} (на 1 – 2%) по сравнению с обратным временем перехода в беспримесном нанокристалле.

Напротив, переходы, обусловленные Г-Х смешиванием за счет короткодействующего потенциала иона фосфора, могут быть заметно ускорены (раздел 5.3). Показано, что для нанокристаллов с размерами 2 – 4 нм, при центральном положении примеси, такие переходы оказываются намного быстрее переходов, идущих с участием фононов, см. рис. 3. Это приводит к увеличению полной скорости излучательной рекомбинации по сравнению со случаем нелегированного кристаллита.

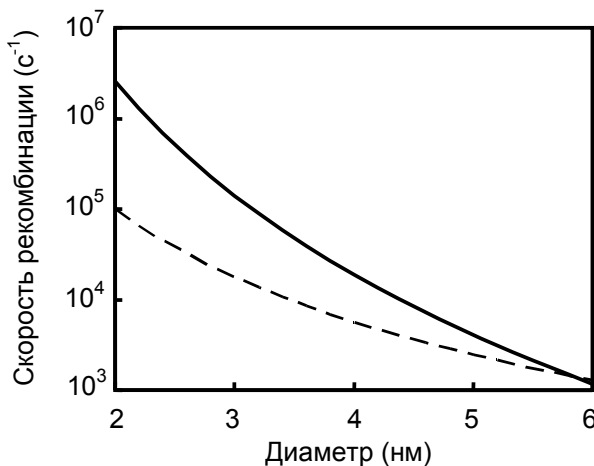


Рис. 3. Скорость излучательного перехода, индуцированного потенциалом центральной ячейки τ_D^{-1} (сплошная линия), как функция диаметра нанокристалла при центральном положении донора. Штриховая линия – скорость рекомбинации в нелегированном нанокристалле τ_{R0}^{-1} .

Было также обнаружено, что τ_D^{-1} уменьшается с увеличением смещения донора h от центра квантовой точки (см. рис. 4). Падение резко усиливается при значениях $h > 0.4R$. Причина заключается в ослаблении воздействия потенциала центральной ячейки на состояние электрона по мере приближения к границе квантовой точки, ввиду существенного уменьшения в этой области электронной плотности.

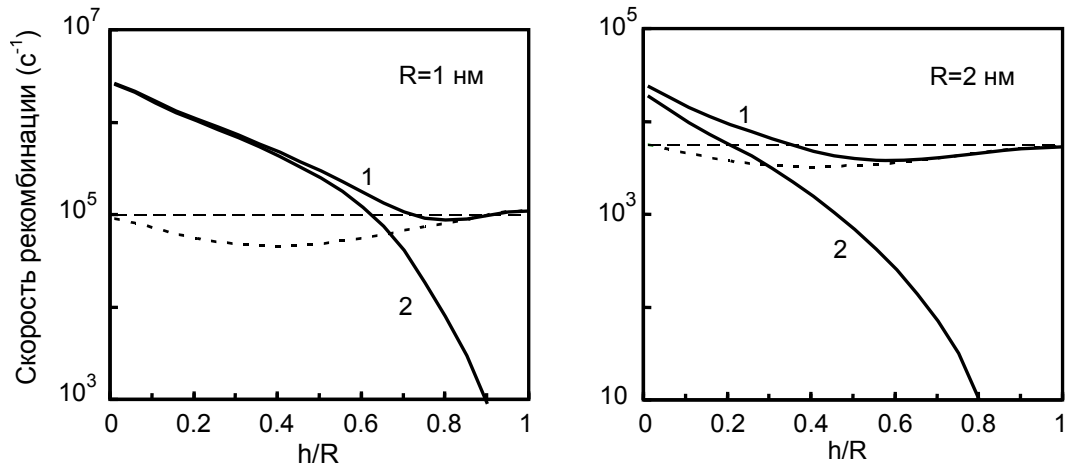


Рис. 4. Скорость излучательного перехода как функция относительного смещения донора: 1 – полная скорость излучательного перехода τ_R^{-1} , 2 – τ_D^{-1} , пунктир – τ_{ph}^{-1} , штриховая линия – τ_{R0}^{-1} .

Анализ зависимости скорости излучательной рекомбинации от положения донора позволяет ввести понятие эффективной области легирования – такой области в нанокристалле, находясь в которой, фосфор способен значительно увеличить скорость излучательной рекомбинации и усилить интенсивность фотолюминесценции по сравнению со случаем нелегированной квантовой точки. Как видно из рис. 4, размер области эффективного легирования уменьшается с увеличением размера нанокристалла.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

В представленной диссертационной работе построена теория излучательной межзонной рекомбинации в кремниевых нанокристаллах с мелкими примесями – бором и фосфором. С этой целью была рассчитана электронная структура кристаллитов с примесями и вычислены времена электронно-дырочных радиационных переходов. В частности:

1. Рассчитана электронная структура кремниевой квантовой точки, легированной водородоподобным акцептором (бором). При произвольном положении примеси в квантовой точке вырождение в спектре полностью снимается, за исключением двукратного вырождения по спину. В валентной зоне электронная плотность в основном состоянии смещается в направлении акцептора, а в зоне проводимости – в противоположную сторону.
2. Был найден энергетический спектр и волновые функции электронов в кремниевой квантовой точке с донором замещения (фосфором) с учётом короткодействующего потенциала центральной ячейки. В зоне проводимости короткодействующий потенциал примеси порождает долинно-орбитальное взаимодействие, что приводит к сильному расщеплению основного уровня нелегированного нанокристалла и появлению большого химического сдвига (около 1 эВ для нанокристалла радиусом 1 нм).
3. В валентной зоне эффект потенциала центральной ячейки выражен гораздо слабее и приводит только к некоторым количественным поправкам в спектре и волновых функциях. Донор отталкивает электронную плотность, если электрон находится в основном состоянии. Однако, если донор расположен вблизи центра нанокристалла, электронная плотность отлична от нуля в точке

нахождения донора. Это обусловлено выталкиванием ее потенциалом конфинмента от границы квантовой точки.

4. Произведён расчёт времён излучательной рекомбинации в кремниевых нанокристаллах, как для бесфононных переходов, так и для переходов с участием фононов. Показано, что при легировании бором, в квантовых точках, имеющих размер больше 2 нм, доминируют излучательные процессы, связанные с фононами. Обнаружено, что легирование квантовых точек бором не приводит к интенсификации излучательных переходов, а в случае нецентрального положения примеси происходит некоторое уменьшение (до 50%) скорости излучательной рекомбинации.
5. В случае нанокристаллов, легированных фосфором, было показано, что переходы с участием фононов не способны увеличить скорость излучательного перехода по сравнению с беспримесным нанокристаллом. Однако короткодействующий потенциал центральной ячейки иона фосфора индуцирует Г-Х смешивание, что приводит к эффективному устранению непрямозонности в нанокристалле, и как следствие, к значительному росту скорости бесфононных переходов. Интенсивность таких переходов резко усиливается с уменьшением размера нанокристалла, что связано с локализирующим действием потенциала конфинмента.
6. Максимальная вероятность прямой излучательной рекомбинации достигается в случае центрального положения иона фосфора и быстро уменьшается с увеличением смещения донора от центра нанокристалла. Кроме того, обнаружено, что размер области в центре нанокристалла, где легирование донора приводит к заметному увеличению излучательного перехода, уменьшается с увеличением размера квантовой точки.

7. Расчеты скоростей межзонной излучательной рекомбинации в кремниевых нанокристаллах с фосфором и бором качественно объясняют результаты экспериментальных работ [4] и [5], соответственно, в которых было обнаружено усиление [4] и ослабление [5] интенсивности фотолюминесценции.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] H. Takagi, H. Ogawa, Y. Yamazaki, A. Ishizaki, and T. Nakagiri, “Quantum size effects on photoluminescence in ultrafine Si particles”, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 2379-2380 (1990)
- [2] L.T. Canham, “Silicon quantum wire array fabrication by electrochemical and chemical dissolution of wafers” *Appl. Phys. Lett.* **57**, 1046-1048 (1990)
- [3] L. Pavesi, L. Dal Negro, C. Mazzoleni, G. Franzo, and F. Priolo, “Optical gain in silicon nanocrystals”, *Nature* **408**, 440-444 (2000)
- [4] D.I. Tetelbaum, I.A. Karpovich, M.V. Stepikhova, V.G. Shengurov, K.A. Markov, O.N. Gorshkov, *Surface Investigation* **14**, 601 (1998).
- [5] Г.А. Качурин, С.Г. Черкова, В.А. Володин, Д.М. Марин, Д.И. Тетельбаум, Н. Becker, “Влияние имплантации ионов бора и последующих отжигов на свойства нанокристаллов Si”, *ФТП* **40**, 75-81 (2006)
- [6] B. Delley and E.F. Steigmeier, “Quantum confinement in Si nanocrystals”, *Phys. Rev B* **47**, 1397-1400 (1993)
- [7] A. Zunger and Lin-Wang Wang, “Theory of silicon nanostructures”, *Appl. Surf. Sci.* **102**, 350-359 (1996)

- [8] Y. M. Niquet, C. Delerue, G. Allan, and M. Lannoo, “Method for tight-binding parametrization: Application to silicon nanostructures”, *Phys. Rev. B* **62**, 5109-5116 (2000)
- [9] A. Baldereschi, N.O. Lipari, “Cubic contribution to the spherical model of shallow impurity states”, *Phys. Rev. B* **9**, 1525-1539 (1974)
- [10] P.B. Allen, M. Cardona, “Theory of the temperature dependence of the direct gap of germanium”, *Phys. Rev. B* **23**, 1495-1505 (1981)
- [11] J. Linnros, N. Lalic, A. Galeckas, V. Grivickas, “Analysis of stretched exponential photoluminescence decay from nanometer sized silicon crystals in SiO₂”, *J. Appl. Phys.* **86**, 6128 (1999).
- [12] Y. Kanemitsu, “Photoluminescence spectrum and dynamics in oxidized silicon nanocrystals: A nanoscopic disorder system”, *Phys. Rev. B* **53**, 13515-13520 (1996)
- [13] C. Delerue, G. Allan, C. Reynaud, O. Guillois, G. Ledoux, F. Huisken, “Multiexponential photoluminescence decay in indirect-gap semiconductor nanocrystals”, *Phys Rev B* **73**, 235318-1-235318-4 (2006)

СПИСОК РАБОТ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи, опубликованные в ведущих рецензируемых журналах и изданиях, утверждённых ВАК РФ:

- [A1] В.А.Беляков, В.А.Бурдов, Д.М.Гапонова, А.Н.Михайлов, Д.И.Тетельбаум, С.А.Трушин, “Излучательная электронно-дырочная рекомбинация в кремниевых квантовых точках с участием фононов”, *ФТТ* **46**, 31-37 (2004)
- [A2] В.А.Беляков, В.А.Бурдов, “Структура основного состояния электронов и дырок в кремниевой квантовой точке с мелким донором”, *Поверхность*, №2, 40-43 (2007)

- [A3] V.A.Belyakov, V.A.Burdov, "Chemical-shift Enhancement for Strongly Confined Electrons in Silicon Nanocrystals", *Phys. Lett. A* **367**, 128-134 (2007)
- [A4] V.A.Belyakov, V.A.Burdov, "Valley-Orbit Splitting in Doped Nanocrystalline Silicon: k-p calculations", *Phys. Rev. B* **76**, 045335-1-045335-12 (2007)
- [A5] V.A.Belyakov, V.A.Burdov, "Anomalous splitting of the hole states in silicon quantum dot with shallow acceptor", *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 025213-1-025213-13 (2008)

Публикации в других изданиях:

- [A6] V.A.Belyakov, V.A.Burdov, "Fine splitting of electron states in silicon nanocrystal with a hydrogenlike shallow donor", *Nanoscale Res. Lett.* **2**, 569-575 (2007)
- [A7] A.N.Mikhaylov, D.I.Tetelbaum, V.A.Burdov, O.N.Gorshkov, A.I.Belov, D.A.Kambarov, V.A.Belyakov, V.K.Vasiliev, A.I.Kovalev, D.M.Gaponova, "Effect of ion doping with donor and acceptor impurities on intensity and lifetime of photoluminescence from SiO₂ films with silicon quantum dots", *J. Nanosci. Nanotechnol.* **8**, 780-789 (2008)
- [A8] V.A. Belyakov, V.A. Burdov, R. Lockwood, A. Meldrum, "Silicon Nanocrystals: Fundamental Theory and Implications for Stimulated Emission", *Adv. Opt. Tech.* **2008**, 279502 (2008)
- [A9] В.А. Беляков, В.А. Бурдов, Д.М. Гапонова и др., "Излучательная электронно-дырочная рекомбинация в кремниевых квантовых точках с участием фононов", *Материалы совещания "Нанопотоника"*, т.2, с.240-241, Н.Новгород (2003)
- [A10] В.А. Беляков, В.А. Бурдов, "Расчет времени электронно-дырочной рекомбинации, идущей с участием фононов, в кремниевых

квантовых точках”, Сборник докладов 22-х научных чтений им. академика Н.В. Белова. Н.Новгород (2003).

[A11] В.А. Беляков, В.А. Бурдов, “Излучательная электронно-дырочная рекомбинация в кремниевых квантовых точках, идущая с участием фононов”, сборник трудов IV Международной конференции “Аморфные и микрокристаллические полупроводники”, с. 159, Санкт-Петербург (2004).

[A12] В.А. Беляков, В.А. Бурдов, “Оптические излучательные переходы в кремниевых квантовых точках”, Сборник трудов 4-ой межрегиональной молодёжной научной школы, с.36, Саранск (2005)

[A13] В.А. Беляков, В.А. Бурдов, “Примесные состояния в кремниевых квантовых точках”, Сборник трудов V Международной конференции “Аморфные и микрокристаллические полупроводники”, с. 259-260, Санкт-Петербург (2006)

[A14] В.А. Беляков, В.А. Бурдов, “Тонкая структура энергетического спектра носителей в кремниевых квантовых точках с мелкими донорами”, Материалы совещания “Нанозифика и наноэлектроника”, т.2, с. 311-312, Н.Новгород (2006)

[A15] В.А. Беляков, В.А. Бурдов, “Структура энергетических уровней электронов и дырок в кремниевых квантовых точках с мелкими донорами”, XI Нижегородская сессия молодых учёных. Естественнонаучные дисциплины, с.8, Н.Новгород (2006)

[A16] В.А. Беляков, В.А. Бурдов, “Междолинное смешивание в кремниевых нанокристаллах с мелкими донорами”, 1-я Всероссийская конференция “Физические и физико-химические основы ионной имплантации”, с. 41, Н.Новгород (2006)

[A17] В.А. Бурдов, В.А. Беляков, А.Н. Михайлов и др., “Аномально сильный химический сдвиг и особенности фотолюминесценции в кремниевых нанокристаллах с мелкими донорами замещения”,

Материалы совещания "Нанофизика и наноэлектроника", т.2, с. 396, Н.Новгород (2007)

[A18] В.А. Беляков, "Влияние мелких доноров замещения на спектр кремниевых квантовых точек", Сборник докладов XII Нижегородской сессии молодых учёных, с.10, Н.Новгород (2007)

[A19] В.А. Бурдов, В.А. Беляков, "Электронные состояния, энергетический спектр и времена межзонной рекомбинации в кремниевых квантовых точках с донорами. Выход за рамки водородоподобной модели", VIII Российская конференция по физике полупроводников, с. 300, Екатеринбург (2007)

[A20] В.А. Беляков, В.А. Бурдов, "Диэлектрическое усиление и аномально сильное расщепление уровней в слабо легированных нанокристаллах кремния, внедрённых в широкозонные плёнки SiO_2 ", Труды конференции ODPO 10, т. 1, с. 65-67, Ростов-на-Дону (2007)

[A21] А.И. Белов, В.А. Беляков, В.А. Бурдов, А.Н. Михайлов, Д.И. Тетельбаум, "Фотолюминесценция нанокристаллов кремния, сформированных и легированных мелкими донорами методом ионной имплантации в аморфных плёнках SiO_2 ." Труды конференции ODPO 10, т. 1, с. 95-98, Ростов-на-Дону (2007)

[A22] А.И. Белов, В.А. Беляков, В.А. Бурдов, А.Н. Михайлов, Д.И. Тетельбаум, "Г-Х смешивание и «выпрямление» зонной структуры в легированных кремниевых квантовых точках", Материалы совещания "Нанофизика и наноэлектроника", т.1, с. 133-134, Н.Новгород (2008)

[A23] В.А. Беляков, В.А. Бурдов, "Влияние мелких примесей на межзонную излучательную рекомбинацию в кремниевых нанокристаллах, идущую с участием фононов", т.1, с. 133-134, Н.Новгород (2008)