

纳米硅结构薄膜光吸收的温度依赖特性

丁文革 苑 静 李文博 杨彦斌 于 威 傅广生

(河北大学物理科学与技术学院, 河北 保定 071002)

摘要 综合考虑纳米硅结构薄膜的特殊性质,如量子限制效应、光学带隙和光跃迁振子强度对纳米硅粒径尺寸的依赖特性以及光吸收的温度依赖特性等,引入了一个解析表达式来分析具有一定粒径尺寸分布的纳米硅结构薄膜光吸收。结果表明,随着温度的增加,纳米硅结构的带隙减小,吸收光谱曲线整体向上平移,这种温度依赖关系与体硅基本相同。纳米硅结构薄膜光吸收拟合结果与实验数据的比较分析表明,该光吸收模型能够很好地解释纳米硅薄膜在吸收边范围内的光吸收。

关键词 薄膜;光吸收;模型;温度依赖;纳米硅

中图分类号 O469 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201131.0531002

Temperature-Dependent Optical Absorption of Silicon-Nanostructure Thin Film

Ding Wenge Yuan Jing Li Wenbo Yang Yanbin Yu Wei Fu Guangsheng

(College of Physics Science and Technology, Hebei University, Baoding, Hebei 071002, China)

Abstract Considering the quantum confinement effect in silicon nanoparticles, the effect of the mean silicon nanoparticle size on optical band gap, optical transition oscillator strength, and the temperature dependence of optical absorption, a model is introduced to analyze the optical absorption of silicon-nanostructure thin film with a certain size distribution of silicon nanoparticles. The results show that the band gap increases and the absorption spectra curves are shifted vertically with increasing temperature, which is like in bulk silicon. The comparative analysis of the simulation results and experimental data of optical absorption implies that our model can well explain the absorption of silicon-nanostructure thin film in the region of absorption edge.

Key words thin films; optical absorption; model; temperature dependence; silicon nanoparticle

OCIS codes 160.4236; 310.6860; 300.1030; 120.6780

1 引 言

多孔硅室温可见光致发光的发现及其在光电集成方面的潜在应用,激发了人们对纳米硅结构极大的研究兴趣。许多实验研究已表明,在多孔硅和其他纳米硅结构中,可见光致发光能带相对于晶体硅的带隙有较大蓝移,并且可以通过改变沉积条件实现发光峰位的调控。Canham^[1]认为这种发光带的蓝移归因于纳米硅中载流子的量子限制效应引起的纳米硅结构带隙展宽,Lehmann等^[2]通过光吸收测量首次给出了带隙展宽的实验证据。由于量子限制,纳米硅光跃迁的振子强度增加, k 选择定则的破坏引起声子辅助和无声子辅助光跃迁的比例发生改

变,这些机制都会影响光吸收性质。由于各种技术制备的纳米硅薄膜中的纳米硅粒子尺寸不均匀,使得其光吸收性质变得更加复杂。

目前已有大量实验证实了不同纳米硅结构中吸收边随纳米硅粒径的减小而蓝移的现象,并且人们已经尝试采用不同的理论对纳米硅结构薄膜的光吸收性质进行解释^[3~8]。Datta等^[3]把多孔硅看作具有带隙分布的量子线的集合,模拟分析了多孔硅的光吸收过程,认为应该把多孔硅视作间接带隙材料,构成多孔硅的纳米柱直径具有对数正态分布特征,纳米硅光跃迁的振子强度具有尺寸依赖性。Matsumoto等^[4]通过多孔硅光吸收谱的测量与分

收稿日期: 2010-09-16; 收到修改稿日期: 2011-01-26

基金项目: 国家自然科学基金(60940020)资助课题。

作者简介: 丁文革(1966—),女,博士,教授,主要从事光与物质相互作用方面的研究。E-mail: dwg@hbu.edu.cn

析,给出了多孔硅是具有量子尺寸效应的间接带隙半导体的直接证据。Kanemitsu^[5]的分析也指出纳米硅在 1.8~3 eV 范围内的指数吸收是间接带隙的特征。Bhattacharya 等^[6]基于纳米硅粒径的尺寸分布和光跃迁的联合态密度,研究了脉冲激光蒸发方法制备的晶态硅纳米线的光吸收,结果表明其吸收曲线依赖于纳米线的平均直径及其分布。Meier 等^[7]利用时间分辨光致发光测量和静态光吸收测量表明,纳米硅粒子具有间接带隙半导体特征,他们结合纳米硅光吸收振子强度和量子限制的尺寸效应建立了纳米硅结构体系的光吸收模型,虽然能够定性描述吸收边随纳米硅粒子尺寸减小而蓝移的现象,但定量分析不能令人满意。因此需要进一步探索新的模型对纳米硅结构体系的光吸收机制作出合理的解释。在间接半导体材料中,吸收系数对温度具有独特的依赖性,通过温度的变化来分析纳米硅光吸收的机制不失为一条有效的途径,而且对其温度依赖特性的深入研究在纳米硅结构薄膜应用方面也具有重要意义,但是迄今对纳米硅光学性质的温度依赖特性的实验和理论报道甚少^[9,10]。

本文引入了一个解析表达式来计算粒径具有确定尺寸分布的纳米硅结构的光吸收,其中结合了量子限制效应和温度的影响。综合考虑了 1) 纳米硅粒子与入射光的作用体积, 2) 量子限制效应引起的带隙展宽, 3) 光跃迁的振子强度和 4) 环境温度等因素的影响,前三个因素依赖于纳米硅粒子的尺寸及其分布。选取两种典型的粒径分布函数,高斯尺寸分布和对数正态尺寸分布,主要关注于吸收系数与温度之间的依赖关系,并将纳米硅结构薄膜光吸收的拟合结果与实验数据进行了比较分析。

2 纳米硅结构薄膜吸收模型

2.1 量子限制效应对纳米硅结构薄膜吸收的影响

对于半导体材料,可采用关系式 $(\alpha E)^\gamma \propto (E - E_g)$ 对其吸收边进行拟合,来判断材料具有间接能带结构($\gamma = 1/2$)还是直接能带结构($\gamma = 2$),其中 α 为吸收系数, E 为入射光子能量, E_g 为体硅的带隙宽度。在纳米硅结构薄膜中,随着硅晶粒尺寸的减小,是否将原来体硅的间接带隙转变为直接带隙是理论上关心的问题之一。在实验上人们通过纳米硅吸收谱的测量来检测是否实现了直接带隙的转变。到目前为止许多研究表明纳米硅粒子具有间接带隙半导体特征^[7,11,12]。马智训等^[11]采用关系式对纳米硅薄膜吸收边进行拟合,发现当 $\gamma = 1/2$ 时的拟合结

果与实验数据更接近,他们结合光致发光谱说明了镶嵌在氧化硅介质中的纳米硅薄膜具有间接能带结构。因此可以认为单个纳米硅粒子的光吸收系数满足

$$\alpha \propto \frac{1}{E}(E - E_g)^2, \quad (1)$$

假设镶嵌在基质中的纳米硅颗粒是直径为 L 球形的粒子,则纳米硅粒子与入射光的作用体积

$$V(L) \propto L^3, \quad (2)$$

由于各种技术制备的纳米硅薄膜中纳米硅粒子均存在一定的尺寸分布,因而这里考虑了两种可能的粒径尺寸分布 $P(L)$ 进行分析,即高斯分布和对数正态分布:

$$P_G(L) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{(L - L_0)^2}{2\sigma^2}\right], \quad (3a)$$

$$P_L(L) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_L L} \exp\left[-\frac{(\ln L - \ln L_0)^2}{2\sigma_L^2}\right], \quad (3b)$$

式中 σ 为标准方差($\sigma = xL_0$), x 为取 0.1~1 的变量, $\sigma_L = \ln \sigma$, L_0 为平均粒径大小。

由于量子限制效应,粒径为 L 的纳米硅粒子的带隙宽度 $E_G(L)$ 为^[3,13,14]

$$E_G(L) = \frac{C}{L^n} + E_g, \quad (4)$$

式中 C 和 n 是与量子限制效应相关的常数,它们的大小依赖于计算带隙所采用的模型。采用无限势垒有效质量模型计算的带隙展宽与实验值比较,存在较大的偏离^[15]。因为在很多情形中,如纳米硅镶嵌在 SiO_2 或 SiN_x 等宽带隙的材料中,系统采用有限势垒有效质量模型更接近实际情况。采用这种模型计算纳米硅粒子的带隙展宽时,导带和价带势垒高度的选取与纳米硅表面不同键合钝化物有关,不过目前仍然没有一致性的结论。一般认为指数 n 可在 1.4~2 范围内变化,而 C 的取值各不相同。这里,选取文献^[16]中采用的 Read 等的计算结果: $n = 2$, $C = 486 \text{ eV}/(10^{-10} \text{ m})^2$ 。

与体硅比较,在纳米硅粒子中电子的平均自由程受小粒径的限制,纳米硅粒子光跃迁的振子强度发生了很大改变。基于有效质量理论的计算,对于粒径为 L 的球形纳米硅粒子的振子强度可由下述关系描述^[3,17,18]:

$$f(L) \propto L^{-\beta}, \quad (5)$$

式中,幂指数 β 依赖于材料的性质以及纳米粒子的尺寸范围。根据 Khurgin 等^[17,18]的分析,选取 $\beta = 6$ 。

综上,假定单个纳米硅粒子为球形,具有间接半

导体特征。对于给定纳米硅粒径尺寸分布的纳米硅结构薄膜,其带隙由(4)式确定。如果考虑到具有粒径尺寸分布的纳米硅结构薄膜的光吸收可以通过来自所有不同尺寸 L 粒子的贡献的集合来获得,那么通过对薄膜中纳米硅粒径尺寸分布[(3)式]、振子强度[(5)式]、作用体积[(2)式]以及单个纳米硅粒子吸收谱[(1)式]的乘积在整个纳米硅粒子的尺寸分布范围内积分,就可以获得标准方差 σ 、平均粒径 L_0 的纳米硅结构薄膜的吸收光谱 $\alpha(E)$,即

$$\alpha(E) \propto \frac{1}{E} \int_{L_1}^{L_2} P(L)f(L)V(L)[E - E_G(L)]^2 dL, \quad (6)$$

式中 L_1 和 L_2 分别为最大、最小纳米硅粒子的粒径值。

2.2 温度对纳米硅结构薄膜光吸收的影响

理论研究表明,在纳米硅结构薄膜中光吸收过程伴有声子的发射或吸收。对于声子参与的间接跃迁,吸收边与温度密切相关。Kovalev 等^[9]测量了多孔硅在 1.5~3 eV 区的吸收系数,其在不同温度下的吸收谱是一些平行的直线,说明多孔硅的带隙对温度的依赖关系与体硅基本相同,满足 $E_g(T) = E_{g0} - \gamma T$,其中 E_{g0} 为 0 K 温度时的带隙宽度, $\gamma = 0.5$ meV/K。对于纳米硅结构薄膜,做类似的假设,即

$$E_G(L, T) = \frac{C}{L^n} + E_g - \gamma T. \quad (7)$$

在纳米硅结构薄膜中由于量子尺寸效应,声子参与跃迁的几率将大为增加,所以对于具有间接带隙特征的纳米硅结构薄膜,其吸收系数表达式还应当考虑平均声子数 $N(E_p)$ 的影响。

对于吸收一个声子,平均吸收声子数 $N_a(E_p)$ 为

$$N_a(E_p) = \frac{1}{\exp(E_p/k_B T) - 1}. \quad (8)$$

对于发射一个声子,平均发射声子数 $N_e(E_p)$ 是将(8)式加 1,即

$$N_e(E_p) = N_a(E_p) + 1 = \frac{1}{1 - \exp(-E_p/k_B T)}, \quad (9)$$

式中 k_B 为玻尔兹曼常数, E_p 为声子能量,在体硅中约为 55 meV。因此,当 $E > E_G(L, T) - E_p$ 时,只能伴随声子的吸收过程,吸收光谱满足

$$\alpha_a \propto \frac{1}{E} \int_{L_1}^{L_2} N_a(E_p) P(L) f(L) V(L) \times$$

$$[E - E_G(L, T) + E_p]^2 dL. \quad (10)$$

当 $E > E_G(L, T) + E_p$ 时,即可伴随声子的发射,也可伴随声子的吸收,其中伴随一个声子发射的吸收光谱满足

$$\alpha_e \propto \frac{1}{E} \int_{L_1}^{L_2} [N_a(E_p) + 1] P(L) f(L) V(L) \times [E - E_G(L, T) - E_p]^2 dL, \quad (11)$$

总的吸收为 $\alpha(\omega) = \alpha_a(\omega) + \alpha_e(\omega)$ 。实际上,可能有多种声子参与,即 $\alpha(\omega) = \alpha_{aTA}(\omega) + \alpha_{eTA}(\omega) + \alpha_{aLA}(\omega) + \alpha_{eLA}(\omega) + \alpha_{aTO}(\omega) + \dots$,其中 TA, LA 分别表示横向和纵向声学声子,TO, LO 为横向和纵向光学声子。由于可能有多种声子参与,在吸收光谱的低能端,会出现复杂的结构。通过分析这些结构,可以了解电声子相互作用的一些信息。

如果 $E - E_G(L, T) \gg E_p$,则纳米硅结构薄膜的吸收系数可近似为

$$\alpha \propto \frac{1}{E} \int_{L_1}^{L_2} [2N_a(E_p) + 1] P(L) f(L) V(L) \times [E - E_G(L, T)]^2 dL. \quad (12)$$

3 结果与分析

为获得不同条件下纳米硅结构薄膜光吸收的变化情况,基于(12)式,利用两种粒径尺寸分布函数分别进行了模拟计算。结果表明,在相同参数下,采用两种分布函数计算得到的吸收系数曲线的形态有一定的差别,但是两种分布函数下的吸收系数随粒径平均尺寸 L_0 、粒径分布 σ 和温度等的变化趋势相同。因此在利用模型模拟不同温度下的纳米硅结构薄膜的光吸收谱线以及带隙随温度变化曲线时只采用了其中的一种高斯分布。图 1 为采用相关参数模拟的 1.8~3.3 eV 能量范围内纳米硅结构薄膜在不同温度下的光吸收谱。按照纳米硅镶嵌结构的研究结果^[19],体硅光学带隙选取了体非晶硅带隙值 1.56 eV,即 $E_{g0} = 1.56$ eV。其它参数 $L_0 = 2.1$ nm, $\sigma = 0.7 L_0$,温度分别为 $T = 70$ K, 300 K 和 400 K,粒径尺寸分布为高斯分布。由图可见,随温度的增加,吸收光谱曲线整体向上平移,这与体硅的变化类似,说明纳米硅结构的吸收系数和温度的依赖关系与体硅基本相同。早期 Kovalev 等^[19,20]所做工作也表明了这一观点,这是由于声子受量子限制的影响很弱的缘故。只不过由于量子限制效应,纳米硅的联合态密度和光跃迁的振子强度等有所变化,造

成该范围内光吸收曲线的线型与体硅有所不同。

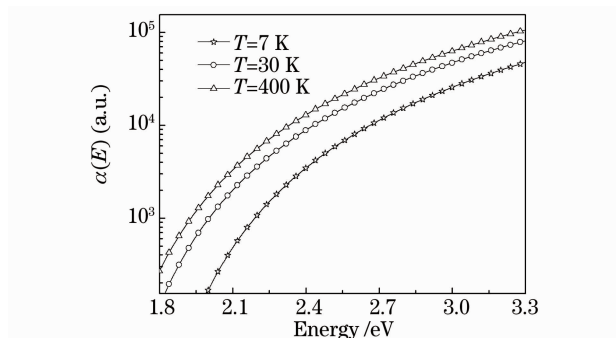


图 1 纳米硅结构薄膜的光吸收谱线

Fig. 1 Optical absorption spectra of silicon-nanostructure thin films

由于晶格受温度影响会产生膨胀和收缩,导致半导体材料各种光学参数(如带隙宽度等)与温度变化密切相关。关于纳米硅结构薄膜的光学带隙,除采用 Tauc 带隙表示外,还通常采用 E_{03} 和 E_{04} 来表示,即吸收系数分别为 10^3 cm^{-1} 和 10^4 cm^{-1} 时所对应的光子能量值。对 $0\sim 300 \text{ K}$ 温度范围内纳米硅结构薄膜带隙 E_{03} 和 E_{04} 随温度变化进行了模拟,如图 2 所示。其中参数 $E_{g0}=1.56 \text{ eV}$, $L_0=2.1 \text{ nm}$, $\sigma=0.7 L_0$, 粒径尺寸分布为高斯分布。由图 2 可见 E_{03} 和 E_{04} 均随温度的增大而减少,在 $0\sim 150 \text{ K}$ 和 $150\sim 300 \text{ K}$ 两段温度范围内,带隙宽度对温度的依赖特性不同。带隙在前一段温度范围内的下降趋势要比后一段平缓一些,这种“两段”温度依赖现象同文献[10]中所描述的情况类似。当温度增大时,电-声子相互作用使带隙减小,晶格膨胀使带隙增大,按照 Franceschetti 等^[21]采用第一性原理对氢钝化的纳米硅温度依赖特性的计算可知,电-声子相互作用对带隙的贡献要大于晶格膨胀的贡献,所以带隙的总体变化趋势为随温度的增大而减小。当温度超过 150 K ,认为晶格膨胀对带隙变化的影响变得更小,

带隙变化主要受电-声子相互作用的影响,造成后一段温度范围内带隙的下降更明显些。总之,在电子跃迁机制中,电-声子相互作用可能起到了非常重要的作用,并且有待进一步研究。

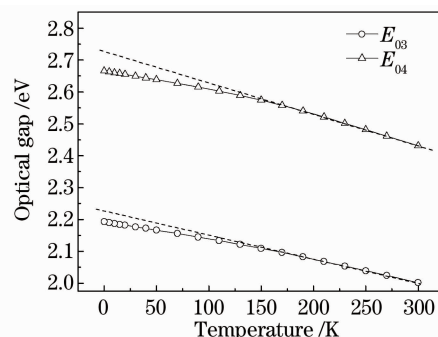


图 2 带隙随温度变化曲线

Fig. 2 Temperature dependence on the optical gap

为便于将模拟结果与实验数据进行比较,本文利用对靶磁控溅射方法制备了一组镶嵌在非晶硅中的纳米硅薄膜样品(样品 a 和样品 b),以 p 型单晶双抛 Si(100)和石英玻璃作为衬底。每次溅射前在 Ar 气环境中放电半小时,以除去 Si 靶表面的氧化层及其他杂质。沉积气压为 0.75 Pa , Ar 和 H_2 气体流量比 $R=1:4$,衬底温度分别为 $500 \text{ }^\circ\text{C}$ 和 $550 \text{ }^\circ\text{C}$ 。采用 HR800 型 Raman 谱仪对样品进行测量,分析了样品的微观结构和物相特征,在室温下采用 ZolixSBP300 型紫外-可见透射光谱仪测量了样品的光吸收谱。样品 a 和样品 b 的光吸收谱实验数据以及模型拟合结果如图 3 所示。通过 Raman 散射测量(这里未给出)结果,得到的样品 a 和样品 b 的平均粒径大小分别为 $L_0=1.9 \text{ nm}$ 和 2.5 nm 。利用前面得到的纳米硅结构薄膜光吸收表达式对光吸收谱的实验结果进行拟合,所得到的相关参数如表 1 所示。由表可见,模型拟合得到的平均粒径与实验结果具有较好的一致性。从图 3(a)和(b)光吸

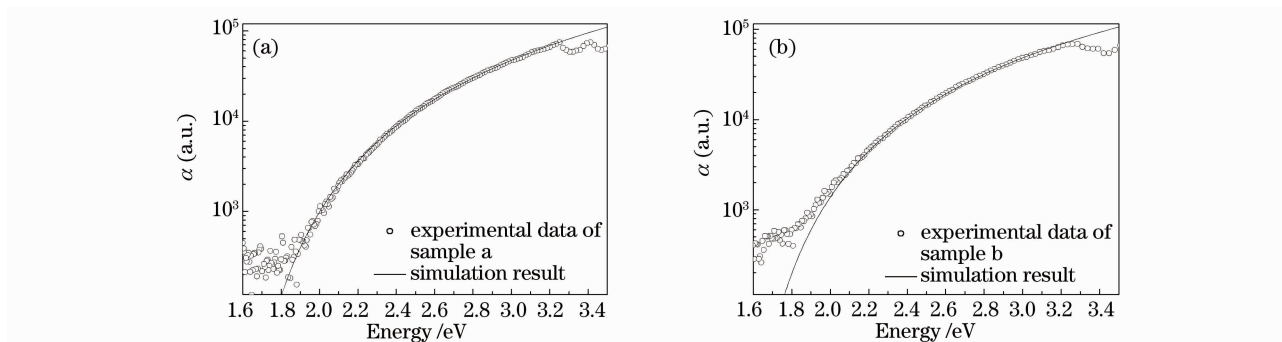


图 3 光吸收谱实验数据与模拟结果的对比。(a)样品 a,(b)样品 b

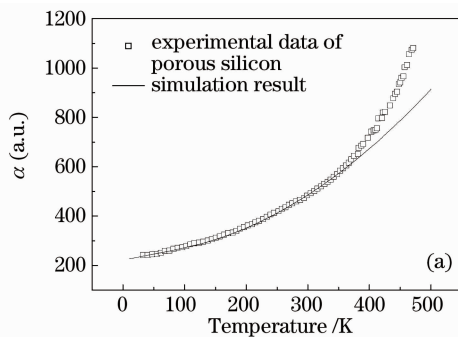
Fig. 3 Comparison between simulation results and experimental data of optical absorption, (a) sample a, (b) sample b

收实验数据与模拟结果的对比可见,在吸收边范围内模拟结果与实验数据符合的非常好,表明该模型能够很好地解释纳米硅在该能量范围内的光吸收。在此能量范围内,薄膜的吸收主要来自纳米硅粒子内部的电子态的吸收,对不同尺寸的纳米硅粒子,其能带结构不同,量子限制效应使得带隙随尺寸显著变化。薄膜中包含有大量带隙在该能量范围的硅粒子,它们对吸收谱产生了重要影响。同时本课题组发现基于粒径的高斯尺寸分布可以很好地描述实验数据,而基于对数正态分布的拟合结果与实验数据偏差较大,这表明两个样品中纳米硅粒径具有高斯尺寸分布的特点。当然,对于不同制备方法、不同条件下沉积的纳米硅镶嵌结构薄膜,利用该模型进行拟合时,要选用合适的粒径尺寸分布函数,拟合结果才能与实验数据具有较好的一致性,从而正确反应出样品中纳米硅的粒径尺寸分布情况。

表 1 不同样品吸收谱的拟合参数

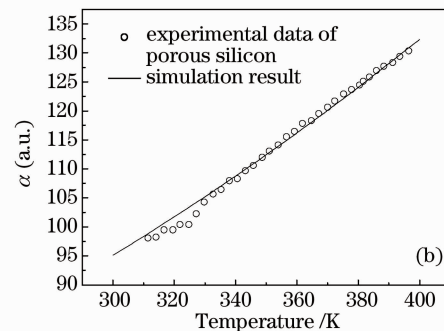
Table 1 Fitting parameters of absorption spectra of different samples

Sample	E_{g_0}/eV	L_0/nm	x	Size distribution
a	1.56	2.1	0.7	Gaussian
b	1.56	2.6	0.6	Gaussian



然而,从图 3 中也可以看到,在低能光吸收谱区,由以上模型拟合各样品吸收谱所得到的曲线与实验数据存在较大差异,拟合结果远小于实验测量的吸收系数值。这种低能区域的光吸收可能来源于包括非晶相在内的纳米硅表面态和缺陷态^[12]。在纳米硅粒子表面由于晶格失配,粒子表面的 Si-Si 键发生重构,其结构与非晶硅类似,出现了一些深的和浅的缺陷态,这些缺陷态形成带尾扩展到能隙中。在本文建立的纳米硅结构薄膜光吸收模型中尚未考虑这一因素,也正是需进一步改进的地方。

对 D. Kovalev 等给出的多孔硅光吸收系数随温度变化的实验数据进行了拟合,如图 4 所示,其中图 4(a)和(b)分别是入射光子能量为 2.3 eV 和 1.96 eV 时吸收系数测量结果。由图 4 可见,在 30~400 K 的温度区间内符合得较好,这也是大多数光电器件工作的温度区间。随着温度的增大,吸收系数逐渐非线性增长。当温度大于 400 K 以后,模拟曲线和实验数据出现了很大偏差。推断在高温环境下,各种声子参与辅助跃迁的过程变得更加复杂,导致本文模型不能很好地与实验数据相符合。

图 4 多孔硅光吸收系数温度依赖实验数据与模拟结果的对比。(a) $E=2.3\text{ eV}$, (b) $E=1.96\text{ eV}$ Fig. 4 Comparison between simulation results and experimental data on temperature dependence of optical absorption coefficient in porous silicon. (a) $E=2.3\text{ eV}$, (b) $E=1.96\text{ eV}$

4 结 论

纳米硅结构薄膜的光吸收不仅受量子限制效应影响还与环境温度有关,综合考虑了纳米硅粒子与入射光的作用体积、量子限制效应引起的带隙展宽和光跃迁振子强度的尺寸依赖特性,并结合环境温度等因素的影响,引入一个简单的模型来分析纳米硅结构薄膜的光吸收。结果表明,随着温度的增加,纳米硅结构的带隙减小,吸收光谱曲线整体向上平移,这种温度依赖关系与体硅基本相同。纳米硅结构薄膜光吸收拟合结果与实验数据的比较分析表

明,该光吸收模型能够很好地解释纳米硅薄膜在吸收边范围内的光吸收。但是对于低能区域的光吸收以及高温环境下各种声子参与辅助跃迁的光吸收过程有待进一步的研究。

参 考 文 献

- 1 L. T. Canham. Silicon quantum wire array fabrication by electrochemical and chemical dissolution of wafers[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1990, **57**(10): 1046~1048
- 2 V. Lehmann, U. Gosele. Porous silicon formation: A quantum wire effect[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1991, **58**(8): 856~858
- 3 Shouvik Datta, K. L. Narasimhan. Model for optical absorption

- in porous silicon[J]. *Phys. Rev. B*, 1999, **60**(11): 8246~8252
- 4 Takahiro Matsumoto, Junichi Suzuki, Masato Ohnuma *et al.*. Evidence of quantum size effect in nanocrystalline silicon by optical absorption[J]. *Phys. Rev. B*, 2001, **63**: 195322-1~195322-5
- 5 Y. Kanemitsu. Photoluminescence spectrum and dynamics in oxidized silicon nanocrystals: A nanoscopic disorder system[J]. *Phys. Rev. B*, 1996, **53**(20): 13515~13520
- 6 S. Bhattacharya, D. Banerjee, K. W. Adu *et al.*. Confinement in silicon nanowires: Optical properties[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2004, **85**(11): 2008~2010
- 7 Cedrik Meier, Andreas Gondorf, Stephan Lüttjohann *et al.*. Silicon nanoparticles: Absorption, emission, and the nature of the electronic bandgap[J]. *J. Appl. Phys.*, 2007, **101**: 103112-1~103112-8
- 8 Ma Zhixun, Liao Xianbo, Kong Guanglin *et al.*. Optical properties of nanocrystalline silicon embedded in SiO₂[J]. *Science in China (Series A)*, 1999, **42**(9): 995~1002
- 9 D. Kovalev, G. Polisski, M. Ben-Chorin *et al.*. The temperature dependence of the absorption coefficient of porous silicon[J]. *J. Appl. Phys.*, 1996, **80**(10): 5978~5983
- 10 H. Chen, W. Z. Shena. Temperature-dependent optical properties of B-doped nc-Si: H thin films in the interband region [J]. *J. Appl. Phys.*, 2004, **96**(2): 1024~1031
- 11 Zhixun Ma, Xiaobo Liao, Gonglin Kong. Absorption spectra of nanocrystalline silicon embedded in SiO₂ matrix[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1999, **75**(13): 1857~1859
- 12 Ma Zhixun, Liao Xianbo, Kong Guanglin. Research of optical properties of nanocrystalline silicon[J]. *Science in China (Series A)*, 1999, **29**(7): 625~631
- 马智训, 廖显伯, 孔光临. 纳米硅光学特性的研究[J]. 中国科学 (A 辑), 1999, **29**(7): 625~631
- 13 Mark S. Hybertsen. Absorption and emission of light in nanoscale silicon structures [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1994, **72**(10): 1514~1517
- 14 C. Delerue, G. Allan, M. Lannoo. Theoretical aspects of the luminescence of porous silicon[J]. *Phys. Rev. B*, 1993, **48**(5): 11024~11036
- 15 B. Delley, E. F. Steigmeier. Size dependence of band gaps in silicon nanostructures[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1995, **67**(16): 2370~2372
- 16 V. Ranjan, V. A. Singh. Effective exponent for the size dependence of luminescence in semiconductor nanocrystallites[J]. *Phys. Rev. B*, 1998, **58**(3): 1158~1161
- 17 J. B. Khurgin, E. W. Forsythe, G. S. Tompa *et al.*. Influence of the size dispersion on the emission spectra of the Si nanostructures [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1996, **69**(9): 1241~1243
- 18 M. S. Hybertsen, M. Needels. First-principles analysis of electronic states in silicon nanoscale quantum wires[J]. *Phys. Rev. B*, 1993, **48**(7): 4608~4611
- 19 N. M. Park, C. J. Choi, T. Y. Seong *et al.*. Quantum confinement in amorphous silicon quantum dots embedded in silicon nitride[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2001, **86**(7): 1355~1357
- 20 H. A. Weakliem, D. Redfield. Temperature dependence of the optical properties of silicon[J]. *J. Appl. Phys.*, 1979, **50**(3): 1491~1493
- 21 A. Franceschetti. First-principles calculations of the temperature dependence of the band gap of Si nanocrystals[J]. *Phys. Rev. B*, 2007, **76**(16): 161301-1~161301-4