

不同浓度 Er 掺杂 Si 纳米晶粒电子结构和光学性质的第一性原理研究*

王英龙[†] 王秀丽 梁伟华 郭建新 丁学成 褚立志 邓泽超 傅广生

(河北大学物理科学与技术学院, 保定 071002)

(2011年2月23日收到; 2011年5月23日收到修改稿)

利用基于密度泛函理论的第一性原理, 对不同浓度 Er 掺杂 Si 纳米晶粒的结构稳定性、电子和光学性质进行了研究. 结果表明: Si 纳米晶粒中 Er 掺杂浓度越低, 结构越稳定; Er 掺杂后的 Si 纳米晶粒引入了杂质能级, 导致禁带宽度变窄; 掺杂后的 Si 纳米晶粒在低能区出现了一个较强的吸收峰, 随着浓度的降低, 吸收峰峰值逐渐减小, 甚至消失. 这为 Si 基发光材料的设计提供了理论依据.

关键词: Si 纳米晶粒, 掺杂, 电子结构, 光学性质

PACS: 73.22.-f, 73.61.Cw, 71.15.Mb, 78.67.Bf

1. 引言

Si 基电子学和集成电路是现代信息社会发展计算机和电子信息高技术的重要基础^[1,2], 但 Si 是间接带隙材料, 载流子的复合过程需要声子参与, 发光效率也很低, 在光电子器件方面的应用受到很大的限制, 因此探索新的 Si 基光电子材料是实现 Si 基光电子集成的关键. Si 基发光材料研究的宗旨是在 Si 材料上获得光的发射, 解决光电集成的光源问题. 为此, 可以采取以下两条基本途径: 一是对 Si 单晶进行改性, 迫使其发光^[3-5]; 二是在 Si 衬底上制备具有发光性能的复合材料. 在 Si 中掺 Er 是比较有希望的一种方法^[6], 因为在 Er 离子 4f 电子层中两个最低自旋轨道能级间的跃迁 $^4I_{13/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$ (第一激发态到基态) 发出的光波长在 1.54 μm 附近, 且 $5s^25p^6$ 的电子对 4f 层电子的有效屏蔽, 4f 电子与基质的相互作用很弱, 4f 壳层内跃迁后发射光的波长对具体的基质依赖也很小, 峰宽很窄^[2,7]. 由于波长 1.54 μm 正好在光纤通信中石英光纤的吸收窗口, 且不随温度和激发光强度而改变, 还具有稳定性好又有抗辐射等优点, 所以自从 Ennen 等^[8] 首次

观察到 Si 中掺 Er 在 20 K 下 1.54 μm 的光致发光 (PL) 谱以来, Si 中掺 Er 的研究受到人们的广泛重视. 近年来人们利用离子注入、分子束外延^[9]、等离子体增强化学气相沉积^[10,11]、射频磁控溅射^[7]、脉冲激光烧蚀 (PLA) 沉积^[12] 等薄膜生长技术制备了各种 Er 掺杂 Si 基材料, 证明它的发光性质^[13-16], 并且围绕如何提高 Er 离子的发光强度以及发光机理^[17-20] 进行了大量的实验研究. 研究发现, 可以通过增加 Er 的掺杂浓度^[21-24]、选择合适的退火温度^[10,13,25,26]、掺杂其他元素^[27-31]、控制 O 的掺杂量^[27]、扩大基材的带隙宽度等方法提高 Er 离子的发光强度. 稀土元素在离子晶体中的固溶度非常大, Barriere 等^[24] 提出将掺 Er 的 CaF_2 外延在 Si 片上以引入高浓度的 Er, 将 Er 浓度提高 3—4 个数量级, 并得到了很强的 PL 信号. Komuro 等^[21,22] 采用 PLA 沉积技术制备了浓度可以达到 10^{19} — 10^{21} cm^{-3} 的 Er 掺杂 Si 纳米薄膜, 并实现了室温发光. 研究结果表明, Er 掺杂浓度的增加可提高 Er 掺杂 Si 纳米薄膜的发光强度及发光的时间响应特性.

在理论上, 关于 Si 中掺 Er 的发光模型、点缺陷、发光机理和性质的研究已经取得很多的结果^[32-39], 但是关于不同浓度 Er 掺杂 Si 纳米晶粒

* 国家自然科学基金 (批准号: 10774036)、河北省自然科学基金 (批准号: E2008000631, E2011201134)、河北省光电材料重点实验室和河北大学自然科学基金资助的课题.

[†] E-mail: hdwangyl@hbu.cn

(SiNPs)性质的理论研究很少. 本文采用第一性原理计算了不同浓度 Er 掺杂 SiNPs (Er-SiNPs) 的形成能、电子结构和光学性质, 并对结果进行了详细的理论分析, 为 Si 基材料的设计及应用提供了理论依据.

2. 计算模型与方法

2.1. 理论模型

首先建立了 Si 块材的超原胞, 通过移除 Si 材料相应超晶胞内多余的 Si 原子, 构建了直径 D 分别为 1.1, 1.2, 1.4 和 1.6 nm 的 SiNPs 结构, 且用 H 终止表面 Si 原子的悬键, 在晶胞的各个方向加足够大的真空层, 相邻两个纳米晶粒最外层原子间的距离至少为 0.5 nm, 这样可忽略相邻纳米晶粒原子之间的相互作用. 图 1 所示为 SiNPs 的结构. 为了研究 Er 掺杂在不同直径 SiNPs 中对电子结构和光学性质的影响, 我们分别用一个 Er 原子替换 SiNPs 中心位置的一个 Si 原子, 建立了不同直径的 Er-SiNPs 模型.

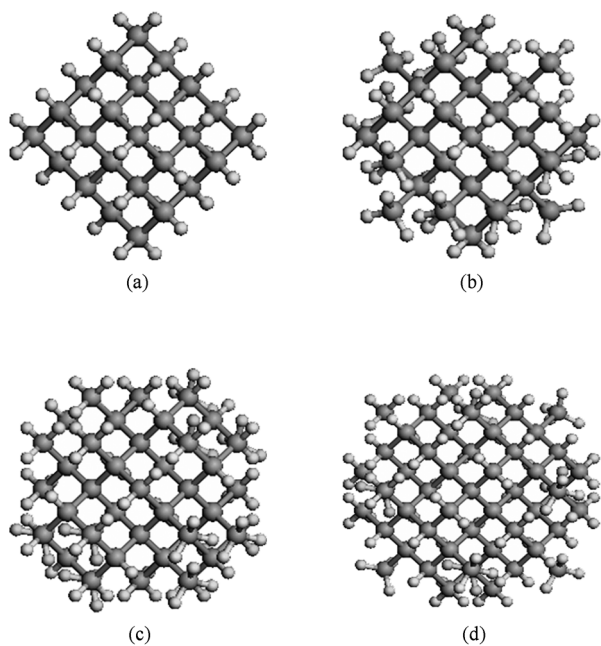


图1 不同直径 SiNPs 结构示意图 (a) $D = 1.1$ nm, (b) $D = 1.2$ nm, (c) $D = 1.4$ nm, (d) $D = 1.6$ nm

2.2. 计算方法

目前, 基于密度泛函理论的第一性原理已经

广泛应用于物理、化学、生物和医学等领域, 可以研究陶瓷、金属、半导体的多种性质, 如电子结构^[40,41]、磁性^[42]、表面吸附性质和光学性质^[43,44]等; 还成功地应用于纳米领域, 研究纳米线、纳米管及纳米束的多种性质^[45,46]. 在新材料的制备及物性研究中为实验提供了指导, 并且为许多实验结果做出合理的理论解释. 本文工作使用基于密度泛函理论的第一性原理 CASTEP (Cambridge Serial Total Energy Package) 软件包完成计算. 我们首先采用 BFGS 算法对晶粒结构进行优化, 在优化过程中, 选择超软赝势平面波法和广义梯度近似的 PW91 交换关联能, 平面波截止能 $E_{\text{cut}} = 290$ eV, 自洽收敛精度平均每个原子为 2×10^{-5} eV, k 点网格数为 $1 \times 1 \times 1$, 原子间的相互作用力不超过 0.05 eV/nm, 晶体应力收敛标准为 0.1 GPa, 原子的最大位移收敛标准为 2.0×10^{-3} nm, 选取原子的价电子组态为 Si $3s^2 3p^2$, H $1s^1$, Er $4f^{12} 5s^2 5p^6 6s^2$. 对晶胞内坐标优化后进行电子结构和光学性质的计算, 然后选择规范-守恒 (norm-conserving) 赝势, 取较高的截断能 (300 eV) 计算光学性质, 最后对计算结果进行分析.

2.3. 光学性质的理论描述

在线性响应范围内, 固体的宏观光学响应函数可以由光的复介电函数来描述. 复介电函数为频率 ω 的函数, $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$, 当频率 ω 一定时, 介电函数虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 与光吸收 $\alpha(\omega)$ 密切相关.

从直接跃迁概率的定义可推导出下列公式^[47]:

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{\pi}{\epsilon_0} \left(\frac{e}{m\omega} \right)^2 \sum_{V,C} \left\{ \int_{\text{BZ}} \frac{2dK}{(2\pi)^3} |aM_{CV}(K)|^2 \times \delta[E_C(K) - E_V(K) - \hbar\omega] \right\}, \quad (1)$$

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega}{nc} \epsilon_2, \quad (2)$$

其中 C 和 V 分别表示导带和价带, BZ 为第一布里渊区, K 为倒格矢, $|aM_{CV}(K)|^2$ 为动量跃迁矩阵元, $E_C(K)$ 和 $E_V(K)$ 分别为导带和价带上的本征能级. (1) 和 (2) 式表明固体的宏观光学常数与其微观能带结构、跃迁矩阵元和状态密度相联系, 因此, 根据固体的能带结构, 利用 Kramers-Krönig 色散关系就可对固体的各种宏观光学常数进行计算, 并可对光学性质进行分析.

3. 结果及讨论

3.1. 几何优化结果与体系的稳定性

为了得到体系的稳定结构,建立结构后对纳米晶粒进行了几何优化.由于在优化结构时只对结构的内坐标进行了优化,因此优化前后晶格常数和体积不变,晶格常数 $a = b = c = 0.543 \text{ nm}$.优化前 Er-SiNPs 中杂质原子与附近 Si 原子间的键长和杂质原子附近 Si—Si 键长分别为 0.235 和 0.384 nm .优化后晶粒的 Er—Si 和 Si—Si 键长列于表 1 中.从表 1 可以看出,稳定结构中 Er—Si 和 Si—Si 键长明显增大,这是因为 Er 的原子半径比 Si 的原子半径要大得多,当 Er 原子替代了 Si 晶体中的一个 Si 原子后,周围的原子被迫地向外发生了移动.

表 1 不同直径 Er-SiNPs 的键长和形成能

D/nm	1.1	1.2	1.4	1.6
Er—Si 键长/nm	0.288	0.287	0.281	0.282
Si—Si 键长/nm	0.473	0.470	0.458	0.460
E_f/eV	-3.37	-9.49	-13.55	-19.24

缺陷形成能是材料结构稳定性的主要判据,还决定着 Er 在 Si 中的固溶度,进而影响材料的发光效率.在给定生长条件下,低缺陷形成能对应着杂质的高固溶度.为了分析 Er-SiNPs 的稳定性,我们计算了 Er 替换不同直径 D 的 SiNPs 中心位置 Si 原子的形成能. Er-SiNPs 体系的缺陷形成能 E_f 可表示为

$$E_f = E_{\text{Er-SiNP}} - E_{\text{SiNP}} - \mu_{\text{Er}} + \mu_{\text{Si}}, \quad (3)$$

其中 E_{SiNP} 和 $E_{\text{Er-SiNP}}$ 分别为 Er 掺杂前后 SiNPs 的总能量, μ_{Er} 和 μ_{Si} 分别为 Er 原子和 Si 原子的化学势.由(3)式计算出不同直径 Er-SiNPs 的缺陷形成能,结果如表 1 所列.从表 1 可以看出,随着 SiNPs 直径的不断增大,Er-SiNPs 的形成能明显地减小,说明 SiNPs 的直径越大,Er 掺杂越稳定,也就是 Er 的掺杂浓度越低,结构越稳定.

3.2. Er-SiNPs 的电子结构

为了分析 Er 掺杂对 SiNP 电子结构的影响,首先计算了直径 $D = 1.1 \text{ nm}$ SiNP 沿布里渊区高对称点方向的能带结构,结果如图 2 所示.从图 2 可以看出, $D = 1.1 \text{ nm}$ SiNP 是直接带隙半导体,其禁带宽度为 3.47 eV .图 3 所示为直径 $D = 1.1 \text{ nm}$ SiNP

的总态密度(TDOS)和分态密度(PDOS)(垂直虚线为费米能级).从图 3 可以看出,价带基本上分为两个区域,即能量在 $-4.0 \sim 0 \text{ eV}$ 之间的上价带区和能量在 $-10.5 \sim -4.0 \text{ eV}$ 之间的下价带区.上价带主要是由 Si 的 3p 态电子贡献的,而下价带主要是由 Si 的 3s 态电子贡献的;其导带主要来源于 Si

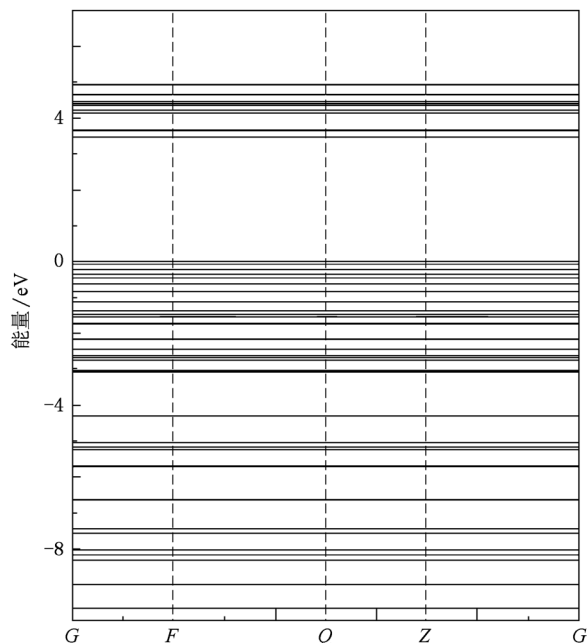


图 2 $D = 1.1 \text{ nm}$ 的 SiNP 的能带结构

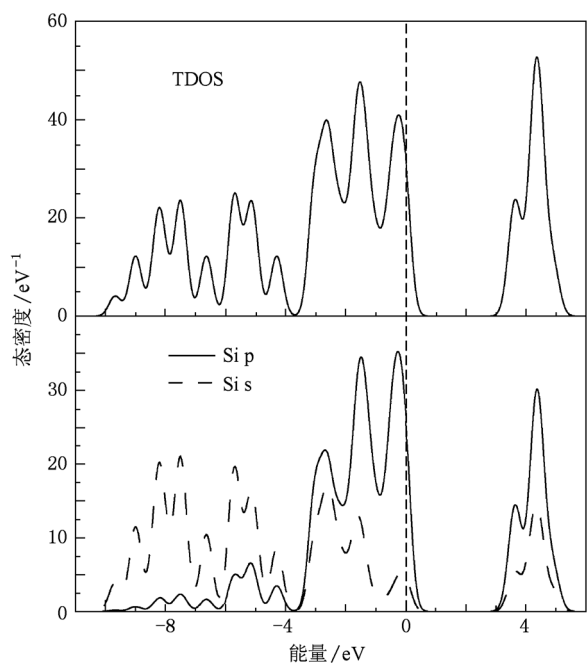


图 3 $D = 1.1 \text{ nm}$ 的 SiNP 的态密度

的 3p 态电子.

图 4 所示为不同直径 Er-SiNPs 的能带结构. 从图 4 可以看出, Er 掺杂没有改变 SiNP 的半导体性质,但在带隙中引入了杂质能级,使得 SiNP 的导带发生了明显下移. 这是由于 Er 5d 轨道与 Si 3p 的反键轨道重新组合后位于杂质能级之上,杂质带与导带相连,从而引起禁带宽度减小,直径 $D = 1.1$ nm Er-SiNP 的禁带宽度变为 0.79 eV. 比较不同直径 Er-SiNPs 的能带结构图可以看出,由于量子限域效

应,当晶粒的直径 D 从 1.1 nm 增大到 1.6 nm 时,源于 Si 的 3p 电子和 Er 的 5d 电子的能级,无论是导带还是价带,均逐渐向下发生了移动;而费米面附近 Er 的 4f 态并没有受到纳米晶粒大小的影响,所以 Er-SiNP 的带隙不受颗粒大小的影响,从而保证了波长为 1.54 μm 的光的产生. 这是由于外壳层 $5s^25p^6$ 的电子对 4f 层电子的有效屏蔽,4f 电子与基质的相互作用很弱,使得由 4f 壳层内跃迁后发射光的波长对具体的基质依赖性减小.

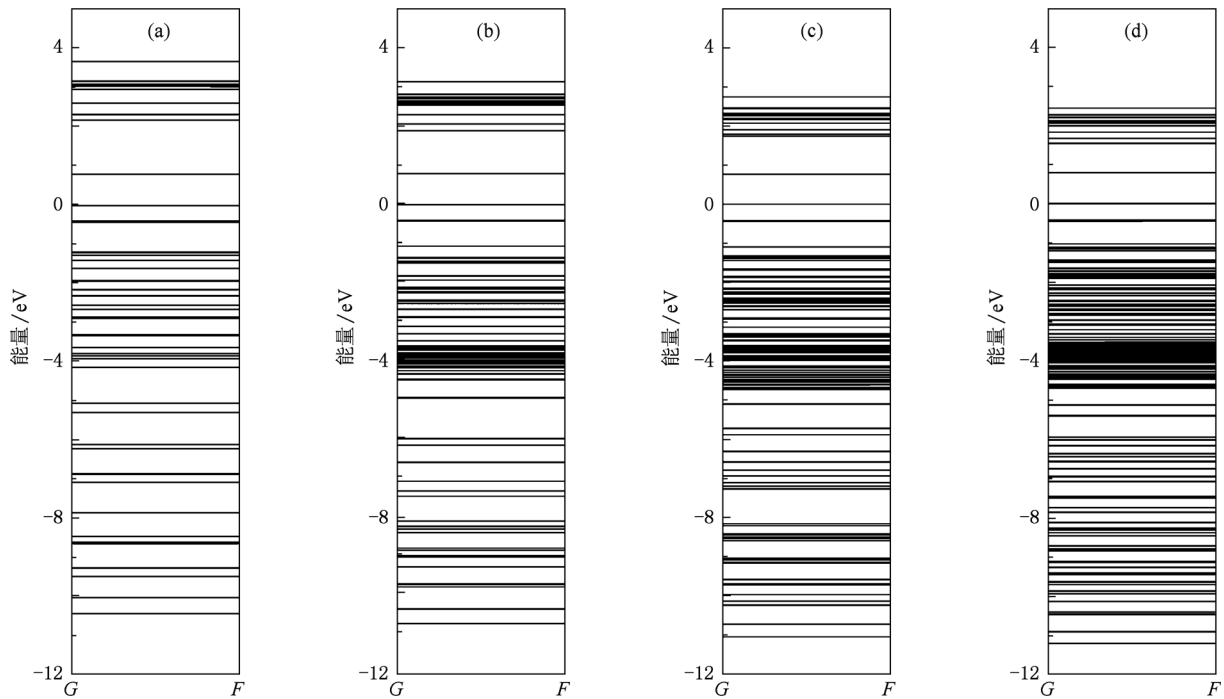


图 4 不同直径 Er-SiNPs 的能带结构 (a) $D = 1.1$ nm, (b) $D = 1.2$ nm, (c) $D = 1.4$ nm, (d) $D = 1.6$ nm

图 5 示出了与 $D = 1.1$ nm 的 Er-SiNP 能带结构相对应的 TDOS 和 PDOS. 从图 5 可以看出,Er-SiNP 的上价态是由 Si 的 3p 态电子、Er 的 6s, 5d 和 4f 态电子贡献的,下价态主要由 Si 的 3s 态电子贡献;其导带来源于 Si 的 3p 态电子和 Er 的 5d,4f 态电子的贡献;而费米能级附近的态密度主要来源于 Er 的 4f 态电子,这是由于 Er 替代内部 Si 产生的局域化的 4f 态电子恰在费米能级附近.

3.3. Er-SiNPs 的光学性质

介电函数作为沟通带间跃迁微观物理过程与固体电子结构的桥梁,反映了固体能带结构及其他各种光谱信息. 利用优化好的结构,计算了 Er-SiNPs 的光学性质. 由于带隙对光学性质的影响及能带计算中对能量的低估,根据块材 Si 的计算值,

我们用剪刀算符将所有的导带向上移动了 0.46 eV. 为了说明 Er 掺杂对 SiNP 光学性质的影响,首先计算了 $D = 1.1$ nm 的 SiNP 的介电函数虚部和光吸收谱. 图 6 所示为 SiNPs 的介电函数的虚部. 从图 6 可以看出; $D = 1.1$ nm 的 SiNP 的介电函数虚部在 5.46 eV 附近有一个强的介电峰,峰值为 1.13;而 $D = 1.1$ nm 的 Er-SiNP 的介电函数虚部在 0.43 eV 附近出现了新的较强介电峰(峰值为 31.01),在 5.46 eV 附近的介电峰值减小为 0.84. 比较不同直径 Er-SiNPs 的介电函数虚部可以发现,随着直径的逐渐增大,在 0.43 eV 附近的介电峰值逐渐减小,在 5.46 eV 附近的介电峰向低能方向移动,而峰值逐渐增大.

图 7 所示为纳米晶粒的光学吸收谱. 从图 7 可以看出:当光子能量约为 3.03 eV 时, $D = 1.1$ nm 的

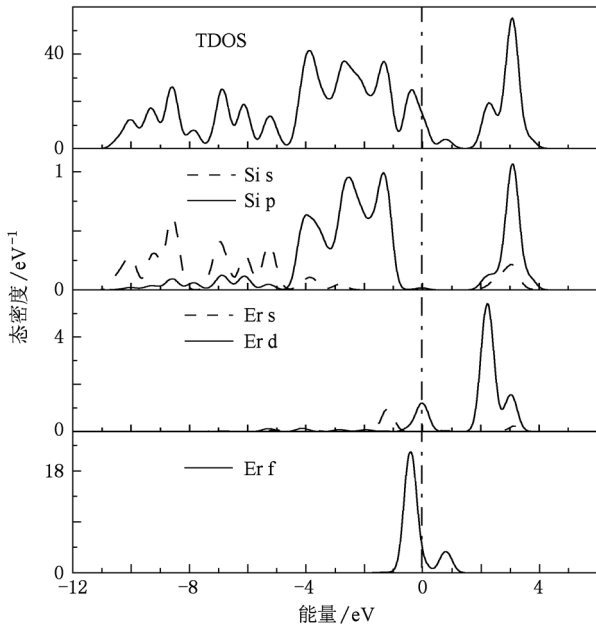


图5 $D = 1.1$ nm 的 Er-SiNP 的态密度

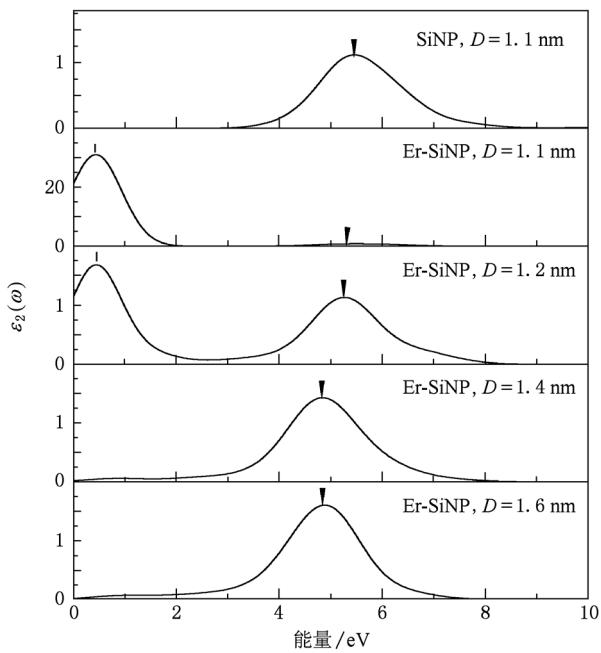


图6 SiNP 和 Er-SiNPs 的介电函数的虚部

SiNP 的光吸收系数开始增大,在 5.88 eV 附近有一强的吸收峰(峰值为 4.79×10^4),其后随着能量的增大,光吸收系数逐渐减小,能量大于 8.86 eV 后吸收系数接近于零;而 Er-SiNP 的吸收系数在能量为 0 eV 时就开始增大,在 1.37 eV 附近出现一个新的较强的吸收峰(峰值为 6.79×10^4),原先在 5.88 eV 附近的吸收峰向低能方向发生移动,吸收峰值

(4.98×10^4)也有所增大,与 SiNP 吸收峰相比,光吸收强度增强.比较不同直径 Er-SiNPs 的吸收谱可发现,随着直径的逐渐增大,在 1.37 eV 附近的吸收强度逐渐减小并发生红移,当直径增大到 1.6 nm 时,附近的吸收强度已为零.这与实验中所得出的在 Er 掺杂的 Si 材料中随着 Er 注入剂量的增加,Er 在 $1.54 \mu\text{m}$ 的 PL 谱强度增加的结果是一致的^[21].而 5.88 eV 附近的吸收峰逐渐地向低能方向发生移动,吸收峰值有所增大.

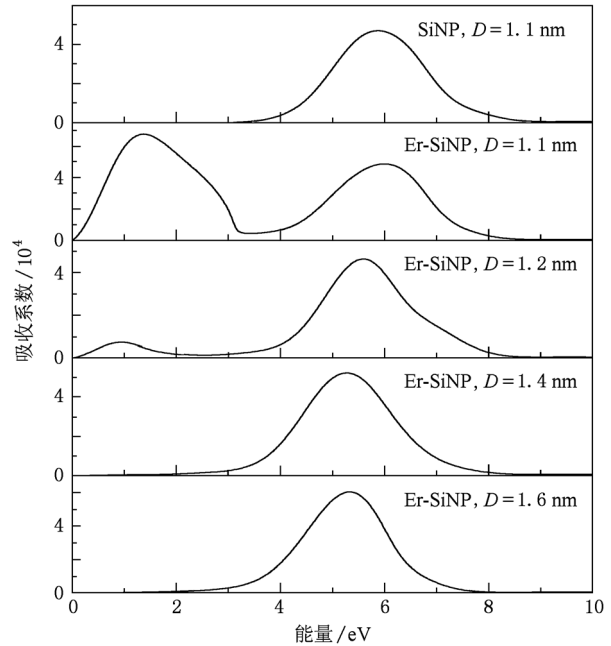


图7 SiNP 和 Er-SiNPs 的光学吸收谱

从以上分析可知,Er 掺杂明显改变了 SiNP 的光学性质,不仅使得 SiNP 原先吸收峰处的吸收强度增强,而且在低能区出现了新的吸收峰.另外,Er 在不同直径 SiNP 中吸收强度的不同,表明当 Er-SiNPs 中 Er 原子的掺杂浓度降低到一定值时,Er-SiNPs 的光学性质接近于 SiNPs,在这种情况下也就失去了掺 Er 的意义.

4. 结 论

利用基于密度泛函理论的第一性原理,对不同浓度 Er-SiNPs 的结构稳定性、电子结构和光学性质进行了研究.结果表明:Er-SiNP 中 Er 掺杂浓度越低,结构越稳定;Er 掺杂后的 SiNP 引入了杂质能级,杂质能级主要来源于 Er 4f 态电子的贡献,Er 的引入使得导带下移,带隙减小;掺杂后的 SiNP 在低

能区出现了一个较强的吸收峰,但随着直径的增大,新的吸收峰峰值逐渐减小,当直径增大到 1.6 nm 时,此吸收峰消失. 研究表明:Er 掺杂后虽然没有改变 SiNP 的半导体性质,但是减小了 SiNP 的带

隙,还明显改变了 SiNP 的光学性质,使得 SiNP 在原先吸收峰处的吸收强度增强,而且增大了低能区的光吸收强度.

- [1] Reed G T 2004 *Nature* **427** 595
- [2] Jhe J H, Shin J H, Kim K J, Moon D W 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 4489
- [3] Wang Y L, Zhou Y, Chu L Z, Fu G S, Peng Y C 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1683 (in Chinese)[王英龙、周阳、褚立志、傅广生、彭英才 2005 物理学报 **54** 1683]
- [4] Fu G S, Wang Y L, Chu L Z, Zhou Y, Yu W, Han L, Peng Y C 2005 *Europhys. Lett.* **69** 758
- [5] Wang Y L, Deng Z C, Chu L Z, Fu G S, Peng Y C 2009 *Europhys. Lett.* **86** 15001
- [6] Lei H B, Yang Q Q, Wang Q M 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 1201 (in Chinese)[雷红兵、杨沁清、王启明 1998 物理学报 **47** 1201]
- [7] Yuan F C, Ran G Z, Chen Y, Zhang B R, Qiao Y P, Fu J S, Qin G G, Ma Z C, Zong W H 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2487 (in Chinese)[袁放成、冉广照、陈源、张伯蕊、乔永平、傅济时、秦国刚、马振昌、宗婉华 2001 物理学报 **50** 2487]
- [8] Ennen H, Schneider J, Pomrenke G 1983 *Appl. Phys. Lett.* **43** 943
- [9] Ennen H, Pomrenke G, Axmann A, Eisele K, Haydl W, Schneider J 1985 *Appl. Phys. Lett.* **46** 381
- [10] Franzo G, Boninelli S, Pacifici D, Priolo F 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 3871
- [11] Andry P S, Varhue W J, Ladipo F, Ahmed K, Adams E, Lavoie M, Klein P B, Hengehold R, Hunter J 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 551
- [12] Izeddin I, Klik M A J, Vinh N Q, Bresler M S, Gregorkiewicz T 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 077401
- [13] Shin J H, Lee W H, Han H S 1999 *Appl. Phys. Lett.* **74** 1573
- [14] Lopeza H A, Fauchet P M 2000 *Appl. Phys. Lett.* **77** 3704
- [15] Iacona F, Pacifici D, Irrera A, Miritello M, Franzo G, Priolo F, Sanfilippo D, Stefano G D, Fallica P G 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 3242
- [16] Aldabergenova S B, Strunk H P, Taylor P C, Andreev A A 2001 *J. Appl. Phys.* **90** 2773
- [17] Ishii M, Ishikawa T, Ueki T, Komuro S, Morikawa T, Oyanagi H, Aoyagi Y 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 4024
- [18] Priolo F, Franzo G, Pacifici D, Vinciguerra V, Iacona F, Irrera A 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 264
- [19] Huang C T, Hsin C L, Huang K W, Lee C Y, Yeh P H, Chen U S, Chen L J 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 093133
- [20] Maria M, Vanessa S, Joe W, Li Ru, Dal Negro L, Jelena V 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 161107
- [21] Komuro S J, Katsumata T, Morikawa T, Zhao X W, Isshiki H, Aoyagi Y 1999 *Appl. Phys. Lett.* **74** 377
- [22] Komuro S J, Maruyama S, Morikawa T, Zhao X W, Isshiki H, Aoyagi Y 1996 *Appl. Phys. Lett.* **69** 3896
- [23] Chen W D, Chen C Y, Bian L F 2005 *Chin. J. Lumin.* **26** 647 (in Chinese)[陈维德、陈长勇、卞留芳 2005 发光学报 **26** 647]
- [24] Barriere A S, Raoux S, Favennec P N, Haridon H L, Moutonnet D 1993 *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **298** 441
- [25] van den Hoven G N, Shin J H, Polman A, Lombardo S, Campisano S U 1995 *J. Appl. Phys.* **78** 2642
- [26] Savchyn O, Ruhge F R, Kik P G, Todi R M, Coffey K R, Nukala H, Heinrich H 2007 *Phys. Rev. B* **76** 195419
- [27] Shin J H, Seo S Y, Lee S J 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 3647
- [28] Kik P G, Brongersma M L, Polman A 2000 *Appl. Phys. Lett.* **76** 2325
- [29] Serna R, Snoeks E, van den Hoven G N, Polman A 1994 *J. Appl. Phys.* **75** 2644
- [30] Yerci S, Li R, Dal Negro L 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 081109
- [31] Warga J, Li R, Basu S N, Dal Negro L 2009 *Physica E* **41** 1040
- [32] Qin G, Qin G G, Wang S 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 6738
- [33] Franzò G, Vinciguerra V, Priolo F 1999 *Appl. Phys. A* **69** 3
- [34] Kenyon A J, Chryssou C E, Pitt C W, Shimizu-Iwayama T, Hole D E, Sharma N, Humphreys C J 2002 *J. Appl. Phys.* **91** 367
- [35] Needels M, Schlüter M, Lannoo M 1993 *Phys. Rev. B* **47** 15533
- [36] Delerue C, Lannoo M 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 3006
- [37] Wan J, Wang X 1999 *Physics* **28** 157 (in Chinese)[万钧、王迅 1999 物理 **28** 157]
- [38] Allan G, Lefebvre I 1993 *Phys. Rev. B* **48** 8572
- [39] Wan J, Ling Y, Sun Q, Wang X 1998 *Phys. Rev. B* **58** 10415
- [40] Wang Y L, Wu Z H, Deng Z C, Chu L Z, Liu B T, Liang W H, Fu G S 2009 *Ferroelectrics* **386** 133
- [41] Zuo C Y, Wen J, Bai Y L 2010 *Chin. Phys. B* **19** 047101
- [42] Wu X W, Wu D J, Liu X J 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4788 (in Chinese)[吴雪炜、吴大建、刘晓峻 2010 物理学报 **59** 4788]
- [43] Xu B, Cheng Z Z, Yi L, Cheng Z 2007 *Chin. Phys.* **16** 3798
- [44] Jin Y J, Lin J B, Li Z Y 2007 *Chin. Phys.* **16** 506
- [45] Ye H G, Chen G D, Zhu Y Z, Lü H M 2007 *Chin. Phys.* **16** 3803
- [46] Deng B, Sun H Q, Guo Z Y, Gao X Q 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 1212 (in Chinese)[邓贝、孙慧卿、郭志友、高小奇 2010 物理学报 **59** 1212]

First principles study of electronic and optical properties of Er-doped silicon nanoparticles with different densities *

Wang Ying-Long[†] Wang Xiu-Li Liang Wei-Hua Guo Jian-Xin Ding Xue-Cheng
Chu Li-Zhi Deng Ze-Chao Fu Guang-Sheng

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

(Received 23 February 2011; revised manuscript received 23 May 2011)

Abstract

The structural stability, the electronic and the optical properties of Er-doped silicon nanoparticles are investigated by first principles based on the density functional theory. The results show that the structure is more stable when the doping concentration of Er atoms is smaller in silicon nanoparticles. The doping of Er atom in silicon nanoparticle introduces the impurity levels which result in the narrowing of band gap. A strong absorption peak occurs in the low-energy region of Er-doped silicon nanoparticles, and the intensity of the absorption peak decreases gradually, even disappears with doping concentration decreasing. The study provides the theoretical basis for the design of silicon-based materials.

Keywords: silicon nanoparticles, doping, electronic structure, optical properties

PACS: 73.22.-f, 73.61.Cw, 71.15.Mb, 78.67.Bf

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10774036), the Natural Science Foundation of Hebei Province, China (Grant Nos. E2008000631, E2011201134), the Key Laboratory of Optical and Electronic Material of Hebei Province, China, and the Natural Science Foundation of Hebei University, China.

[†] E-mail: hdwangyl@hbu.cn