

内电场对纳米硅光致发光谱的影响*

黄 凯 王思慧 施 毅[†] 秦国毅 张 荣 郑有

(南京大学物理系, 固体微结构国家重点实验室, 南京 210093)

(2003 年 7 月 9 日收到, 2003 年 8 月 19 日收到修改稿)

从量子限制发光中心模型出发, 计算了纳米硅的光致发光(PL)特征与发光中心间的关系. 研究发现, 纳米硅与发光中心间的内电场对载流子复合率及峰位振荡有着十分重要的影响. 在 2—5 nm 的尺寸范围内, 纳米硅发光中心上的载流子复合概率远大于内部复合概率, 仅需考虑发光中心上的载流子复合发光. 还发现发光中心与纳米硅粒子间的内电场对于纳米硅的发光峰位振荡有着显著的影响. 发光中心与纳米硅粒子间的内电场的存在会显著减小纳米硅粒子的内部发光效率以及外部相应发光中心上的发光强度, 使得纳米硅 PL 谱的峰位随纳米晶粒尺寸变化而发生复杂的非周期性振荡.

关键词: 内电场, 纳米硅, 光致发光, 量子限制发光中心

PACC: 7855, 7125W

1. 引 言

自 1991 年 Canham^[1]发现了室温下多孔硅的光致发光(PL)现象以来, 硅基材料发光的探索已走过十多年的路程. 人们从早期的研究思路, 如 SiGe/Si 量子阱、量子线、超晶格布里渊区折叠效应等, 逐步转移到新的硅基材料, 纳米量子点结构的研究已成为重要热点^[2-7]. 与此同时, 纳米硅发光机制的探索也一直是一个十分活跃的课题. 早期的理论模型(如量子限制(quantum confinement)模型^[8,9]、表面态模型^[10]、氧化物缺陷模型^[11])仅能解释部分实验结果. 近年来, 秦国刚等^[6,12]提出的量子限制发光中心(QCLC)模型, 已得到了越来越多的支持^[13-18], 并成功地解释了 PL 谱的尺寸效应和温度效应等一系列长期困扰的问题^[16,19-25].

QCLC 模型同时承认量子限制效应和发光中心的重要性, 认为 (1) 载流子的激发是发生在纳米粒子内部的, 由于量子限制效应的存在, 激发能比硅的能隙大得多; (2) 载流子的复合可能发生在纳米粒子内部(这种情形就是量子限制模型), 也可能隧穿到纳米粒子与氧化层界面或氧化层内部的发光中心上, 辐射复合而发光; (3) 在发光中心上复合的概率一般远大于内部复合的概率, 这是因为硅是间接能

隙半导体, 并且存在声子瓶颈效应的缘故. 与量子限制模型相比, QCLC 模型有显著的不同. 首先, 量子限制模型的尺寸效应是 PL 谱峰位随纳米硅尺寸的减小而呈单调的蓝移, 而在 QCLC 模型中, PL 峰位可能不随尺寸变化(当氧化硅中只有一种发光中心时), 也可能随着尺寸的减小峰位呈振荡变化(当氧化硅中有两种发光中心时). 再者, 量子限制模型认为, 缩小维度及尺寸(纳米量子点)有助于改善间接带的性质, 从而减小对声子参与跃迁的依赖, 有利于发光效率的提高. QCLC 模型还进一步考虑了量子点内部的能级分布以及声子瓶颈效应^[26,27]的影响, 对同时可能存在的内部复合和发生在硅量子点外部发光中心上的复合概率加以比较, 认为发光中心上复合概率一般远大于内部复合概率, 且这个比例随着尺寸的减小而增大^[12,24,25].

纳米硅的发光过程是十分复杂的, 其物理过程涉及载流子的能级结构、在不同强度的光激发下的载流子能级占据概率、电子空穴对在纳米硅内部复合概率、载流子在纳米硅内部的弛豫率以及纳米硅氧化层中发光中心的能级结构、发光中心对载流子的俘获率、电子空穴对在发光中心上的复合率等一系列问题. 本文在 QCLC 模型下, 对问题作适当简化, 考虑到硅是间接能隙半导体并且存在声子瓶颈效应的缘故^[26,27], 设电子在各能级上的占据率相等.

* 国家重点基础研究专项基金(批准号: G2001CB309)和国家自然科学基金(批准号: 60206001, 60290084, 60225014)资助的课题.

[†] 通讯联系人. Tel: 025-3685381(0), E-mail: yshi@nju.edu.cn

在本文中,我们着重研究纳米硅发光中心与晶粒间内电场对发光谱的影响特征. 计算结果显示,发光中心上复合概率一般远大于内部复合概率(大 4—12 个数量级),且内电场对 PL 谱的峰位特征有重要影响.

2. QCLC 理论简述

图 1 是 QCLC 模型示意图. 这里用一个边长为 L 的立方体来模拟纳米硅粒. 纳米硅粒的外面是氧化层,其中存在有作用半径为 r_{DC} 的缺陷中心. 缺陷中心分为辐射复合中心(发光中心 LC)和非辐射复合中心. 纳米硅中的电子和空穴的量子态与能级计算采用有效质量近似. 为了简化,考虑电子和空穴在 z 方向处于阱深为 V_{os}^e 和 V_{os}^h 的方势阱中,在 x, y 方向上则为无限深势阱. 这里, V_{os}^e 和 V_{os}^h 分别为导带电子及价带空穴在纳米硅与氧化硅界面的带阶. 载流子的能级和波函数分别为

$$E_{n1, n2, n3} = E_{n1}^x + E_{n2}^y + E_{n3}^z, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \Psi_i(\mathbf{r}) &= \Psi_{n1, n2, n3}(x, y, z) \\ &= \phi_{n1}(x) \cdot \phi_{n2}(y) \cdot \phi_{n3}(z). \end{aligned} \quad (2)$$

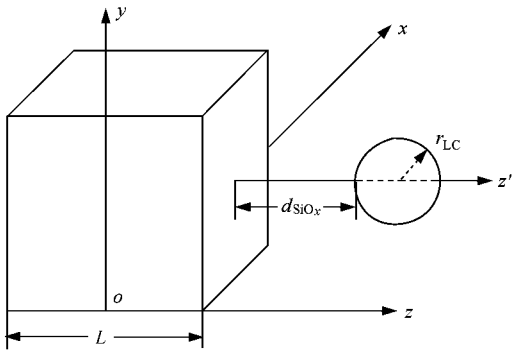


图 1 QCLC 模型示意图

图 2 为纳米硅粒及氧化层中缺陷中心的能级图. 图 2 中的 E_i^e 和 E_j^h 分别是纳米硅中的电子能级及空穴能级, E_g 为硅体材料的禁带宽度, E_c 和 E_v 分别是 SiO_2 的导带底和价带顶的位置, V_{os}^e 及 V_{os}^h 是导带电子及价带空穴在纳米硅与氧化硅界面的带阶. 当硅粒子与缺陷中心二者皆为电中性时,某一缺陷中心(记作 v)的上下两个发光能级分别被记为 $L_{v,u}^-$ 及 $L_{v,d}^0$. 两能级间的能量差 $\Delta_v = \hbar\omega_v$ 则是该种缺陷中心 PL 谱的能量峰值. E_c 与 $L_{v,u}^-$ 之间的差值 W_v 是氧化层中缺陷中心的一个特征参量. 当硅粒子与

缺陷中心二者带有电荷时, $L_{v,u}^0$ ($L_{v,d}^0$) 将被抬高到 $L_{v,u}$ ($L_{v,d}$), 此时两者之间建立起内电场^[28].

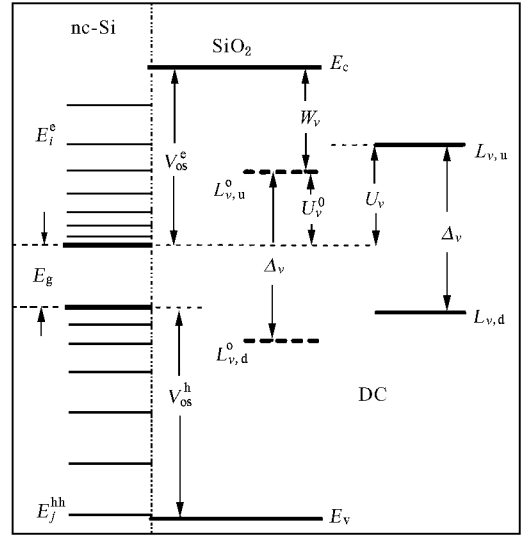


图 2 纳米硅粒及氧化层中缺陷中心的能级图

QCLC 模型中,电子与空穴可以在纳米硅内部复合,其过程称内部复合过程,电子与空穴也可以隧穿入 SiO_2 势垒层,在势垒层中复合,称为外部复合过程. 实验观察到的光谱是内部辐射复合与外部辐射复合过程两者叠加的结果. 内部复合率可表示为

$$\tau_{\text{int}}^{-1}(i) = \tau_{\text{int-r}}^{-1}(i) + \tau_{\text{int-nr}}^{-1}(i), \quad (3)$$

式中第一项是电子从某一初态 i 向所有空穴态的辐射复合率,第二项是处于 i 态电子的非辐射复合概率. 考虑到纳米粒子界面通常是缺陷所在之处,起到非辐射复合中心的作用,可以给出^[25]

$$\tau_{\text{int-nr}}^{-1}(i) \tau_{\text{int-r}}^{-1}(i) = \sqrt{E_n(L)E_0(L)} \exp(L/L_e)^2 - 1, \quad (4)$$

其中 E_0 和 E_n 分别为载流子基态和第 n 激发态的能量,并假设了一个非辐射复合中心所占的面积是 L_e^2 .

外部复合过程是载流子隧穿入 SiO_2 势垒,被缺陷中心吸收并在此复合的过程. 外部复合率是外部辐射复合和外部非辐射复合率之和

$$\tau_{\text{ext}}^{-1}(i) = \tau_{\text{ext-r}}^{-1}(i) + \tau_{\text{ext-nr}}^{-1}(i), \quad (5)$$

这里

$$\begin{aligned} \tau_{\text{ext-r}}^{-1} &= \sum_l \eta_l N_{\text{LCI}} \tau_l^{-1}(i), \\ \tau_{\text{ext-nr}}^{-1} &= \sum_l (1 - \eta_l) N_{\text{LCI}} \tau_l^{-1}(i) \\ &\quad + \sum_l N_{\text{NCI}} \tau_l^{-1}(i), \end{aligned}$$

式中 l 是发光中心的指标, 设有 s 种发光中心, 故 $l = l_1, l_2, \dots, l_s, t = t_1, t_2, \dots, t_m$ 是非辐射复合中心的指标, 设有 m 种发光中心. N_{lCl} 和 N_{NCl} 分别是第 l 种发光中心和第 t 种非辐射复合中心的密度. η_l 是第 l 种发光中心的效率. 另外

$$\tau_v^{-1}(i) = \sum_{\mu} \sigma_v^{\mu}(i) F(\epsilon_i^{\mu}) \chi_i^{\mu}, \quad (6)$$

此处 $\chi_i^{\mu} = \sqrt{2m_{\mu}^*(U_0 - \epsilon_i^{\mu})}/\hbar$. 当 $v = l$ (或 t) 时, (6) 式给出当单位体积内有一个第 v 种缺陷中心时的复合率. m_{μ}^* 是载流子在 μ 方向的有效质量. ϵ_i^{μ} 是在 μ 方向的运动对能量的贡献. $F(\epsilon_i^{\mu}) = \hbar K_i^z / (2m_{\mu}^* L)$ 是处于 i 状态的载流子在 μ 方向运动造成的与势垒的碰撞频率. $K_i^z = \sqrt{\langle (\hat{k}^z)^2 \rangle}$ 是波矢算符 μ 分量的均方根值. $\sigma_v^{\mu}(i)$ 是第 v 种缺陷中心对 i 状态载流子在 μ 方向的吸收截面.

实际存在的纳米硅粒子系统的尺寸不可能是单一的. 进一步考虑一个纳米硅粒子系统, 假设其尺寸分布函数具有如下形式:

$$P(L) = CL^2 \exp[-\Delta L^2 / \delta L^2], \quad (7)$$

式中 C 是归一化常数, $\Delta L = L - L_0$, L_0 是分布中心尺寸, δL 是分布的半宽度. 这样, 通过以上公式进行尺寸平均, 就可得到各种有效值.

载流子内部复合过程随尺寸分布的有效复合率为

$$\begin{aligned} \Gamma_{IRP} &= \Gamma_{l-rr} + \Gamma_{l-nr} \\ &= \langle \sum_i P_i \tau_{l-rr}^{-1}(i) \rangle_{es} + \langle \sum_i P_i \tau_{l-nr}^{-1}(i) \rangle_{es} \end{aligned} \quad (8)$$

式中第一项为内部辐射复合过程对系统的有效复合率, 第二项为内部非辐射复合过程对系统的有效复合率. P_i 为电子的占据率. $\langle \cdot \rangle_{es}$ 表示按 (8) 式求尺寸平均值.

载流子外部复合过程随尺寸分布的有效平均复合率为

$$\begin{aligned} \Gamma_{ORP} &= \Gamma_{0-rr} + \Gamma_{0-nr} \\ &= \langle \sum_i P_i \tau_{0-rr}^{-1}(i) \rangle_{es} + \langle \sum_i P_i \tau_{0-nr}^{-1}(i) \rangle_{es}, \end{aligned} \quad (9)$$

式中等号右端第一项为外部辐射复合过程对系统的有效复合率, 第二项为外部非辐射复合过程对系统的有效复合率. 利用 (5) 式, 可以将外部有效辐射复合率表示为各种发光中心上的有效复合率之和, 即

$$\Gamma_{0-rr} = \sum_l \Gamma_{0-rr}^l, \quad (10)$$

式中

$$\Gamma_{0-rr}^l = \eta_l N_{lCl} \langle \sum_i P_i \tau_l^{-1}(i) \rangle_{es}$$

是发生在第 l 种发光中心上的有效辐射复合率. \sum' 表示求和仅对部分电子进行. 其理由如下: 设 PL 激发下电子所能达到的最大能量是 E_{max}^e , 又假设发光中心产生光辐射的一对能级中, 高能级的能量是 U_l , 显然能量高于 E_{max}^e 以及低于 U_l 的电子不可能参与发光, 因此求和仅对能量低于 E_{max}^e 以及高于 U_l 的电子进行.

假设在光激发前缺陷中心为电中性. 一旦 PL 激发在纳米晶粒内部产生了电子空穴对, 则它们可能在内部复合, 或者先弛豫到低能级再复合, 也可能隧穿到氧化层中被其中的缺陷中心吸收并复合. 一旦某一缺陷中心带有了一个电子, 该缺陷中心对电子的吸收截面将大大降低, 这样使得每个缺陷中心所带电子不超过一个. 需要指出的是, 缺陷中心带负电的同时, 纳米硅晶带有正电, 两者之间将形成一个静电场, 即内电场^[28]. 内电场的存在不仅对发光中心处的能级造成修正, 还会影响对于入射粒子的吸收截面. 随着内电场的增加, 电子的俘获率降低, 空穴的俘获率增大. 内电场的存在对缺陷中心处的能级造成修正, 即 U_v^{in} 应该加到原有的发光能级 (L_{ou} 和 L_{od}) 上去. 设内电场为零时 L_{ou} 的能量为

$$U_v^0 = V_{os}^e - W_v, \quad (11)$$

式中 W_v 是缺陷中心的一个特征参量. 内电场存在时 L_{ou} 的能量为

$$U_v = U_v^0 + U_v^{in}. \quad (12)$$

缺陷中心带电除了改变对于入射粒子的吸收截面以外, 还将改变隧穿到氧化层中的载流子数目. 因为随着内电场的增加, L_{ou} 随之抬高, 能量大于 U_v 的电子数目相应减少, 使得电子的俘获率降低; 同时, 对于空穴而言, L_{od} 随之降低, 能量高于它的空穴数目相应增加, 使得空穴的俘获率增大.

内部及外部复合过程对系统的总有效复合率为

$$\Gamma_T = \Gamma_{IRP} + \Gamma_{ORP}. \quad (13)$$

为了比较内部辐射复合与外部辐射复合的强弱, 定义

$$R^T = \Gamma_{0-rr} / \Gamma_{l-rr}. \quad (14)$$

当 $R^T > 1$ 时, 外部辐射复合过程占优势, 亦即 QCLC 机制占优势. $R^T = 1$ 给出内部辐射复合与外部辐射复合相等的条件, 也就是所谓的临界条件.

3. 纳米硅内部复合率和外部复合率的比较

我们首先假设两种发光中心具有相同的密度, 在计算中取 $N_{LC1} = N_{LC2} = 4.0 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$, 发光中心的发光峰位为 $\hbar\omega_1 = 1.50 \text{ eV}$, $\hbar\omega_2 = 1.90 \text{ eV}$. 设纳米硅粒子为立方颗粒, 并具有 $P(L) \propto L^2 \exp[-(L - L_0)^2 / \delta L^2]$ 形式的尺寸分布, 分布半宽度 $\delta L = 0.05 L_0$, 其中 L_0 是平均尺寸. 设发光中心上的一对能级在内电场为零时被纳米硅的禁带所平分. 这时电子与空穴具有相同的阈值(在 LC1 上为 0.2 eV , 在 LC2 上为 0.4 eV). 阈值的物理意义在于, 如果以导带底或价带顶为零点, 只有能量高于阈值能量的载流子才能被发光中心所俘获. 发光中心与纳米硅之间的内电场我们取为一个参数, 其变化范围为 $0 - 0.3 \text{ eV}$.

严格而言, 纳米硅内部电子的占据率应该由 Pauli Master 方程决定. 考虑到硅是间接能隙半导体, 并且存在声子瓶颈效应, 这里对问题作适当的简化. 设电子在各能级上的占据率相等, 且 $P_i = \text{const} = 0.01$.

为了比较两种发光中心与内部辐射复合的相对 PL 强度, 定义 $R_1 = \Gamma_{0-r}^{LC1} / \Gamma_{l-r}$, $R_2 = \Gamma_{0-r}^{LC2} / \Gamma_{l-r}$. 图 3、图 4 分别给出了 $\log R_1$, $\log R_2$ 与纳米晶粒中心尺寸的关系.

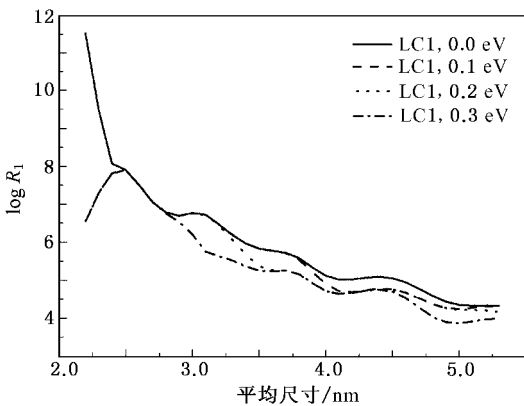


图 3 $\log R_1$ 与纳米硅晶粒尺寸的关系

很明显, 图 3、图 4 中每条曲线都满足 $\log R_1 > 0$, $\log R_2 > 0$ (均在 $4 - 11$ 之间). 也就意味着发生在 LC1 和 LC2 上的有效辐射复合率皆大于内部的有效复合率, 且 R_1, R_2 的值达到 $10^4 - 10^{11}$, 可见对这些

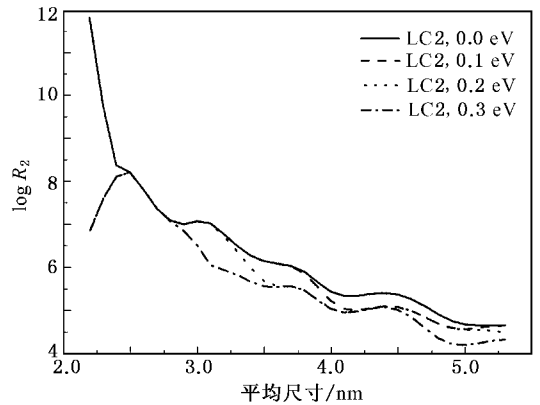


图 4 $\log R_2$ 与纳米硅晶粒尺寸的关系

PL 谱的主要贡献来自于外部辐射复合过程. 由图 3、图 4 看到, 随平均尺寸 L_0 的变化, R_1, R_2 的数值均大致单调减小. 相应的内电场越大, 减小的速率越快. 但是, 在 $2.2 - 2.5 \text{ nm}$ 的范围内, 内电场为零的为减小(实际上内电场为零的情形不容易出现), 内电场大于零的时候则增加, 即在 2.5 nm 的时候这个比值达到了最大值. 总体而言, 内电场的存在和增大降低了内部发光的效率, 在计算的平均尺寸 3.7 nm 处, 内电场为 0.3 eV 时 R_1 仅为内电场为零时计算结果的 30% , 也是在内电场为 0.05 eV 条件下计算结果的 35% .

4. 纳米硅 PL 谱的峰位振荡

图 5 是计算得到的纳米硅发光峰位与尺寸的关系, 每一幅图中的各条曲线 LC1 与硅晶粒间的内电场均相同, 同一图中各条曲线对应于不同的 LC2 与硅晶粒间的内电场.

图 5 的结果显示, 内电场对发光峰位的影响很明显. 发光峰位既不是恒定的, 也与量子限制模型预言的单调蓝移不同, 而是呈现一定程度的波动. 当两个发光中心的内电场相差不大的时候, 在某些尺度范围内, PL 谱峰的波动较小, 出现了峰位被锁住的现象. 而两个发光中心的内电场相差越大, 曲线的波动也越大. 通过以上分析我们可以看到: 由于发光中心和纳米硅粒子间内电场的参与, 纳米硅的发光谱与尺寸的关系是复杂的. 这里我们看到的是在一定的尺寸范围内发生蓝移, 而在另一些尺寸范围内发生红移, 即 PL 谱的峰位随纳米晶粒尺寸变化而发生复杂的非周期性振荡. 这是由于 PL 谱的峰位能量的频移与 LC1 和 LC2 两种发光中心的 PL

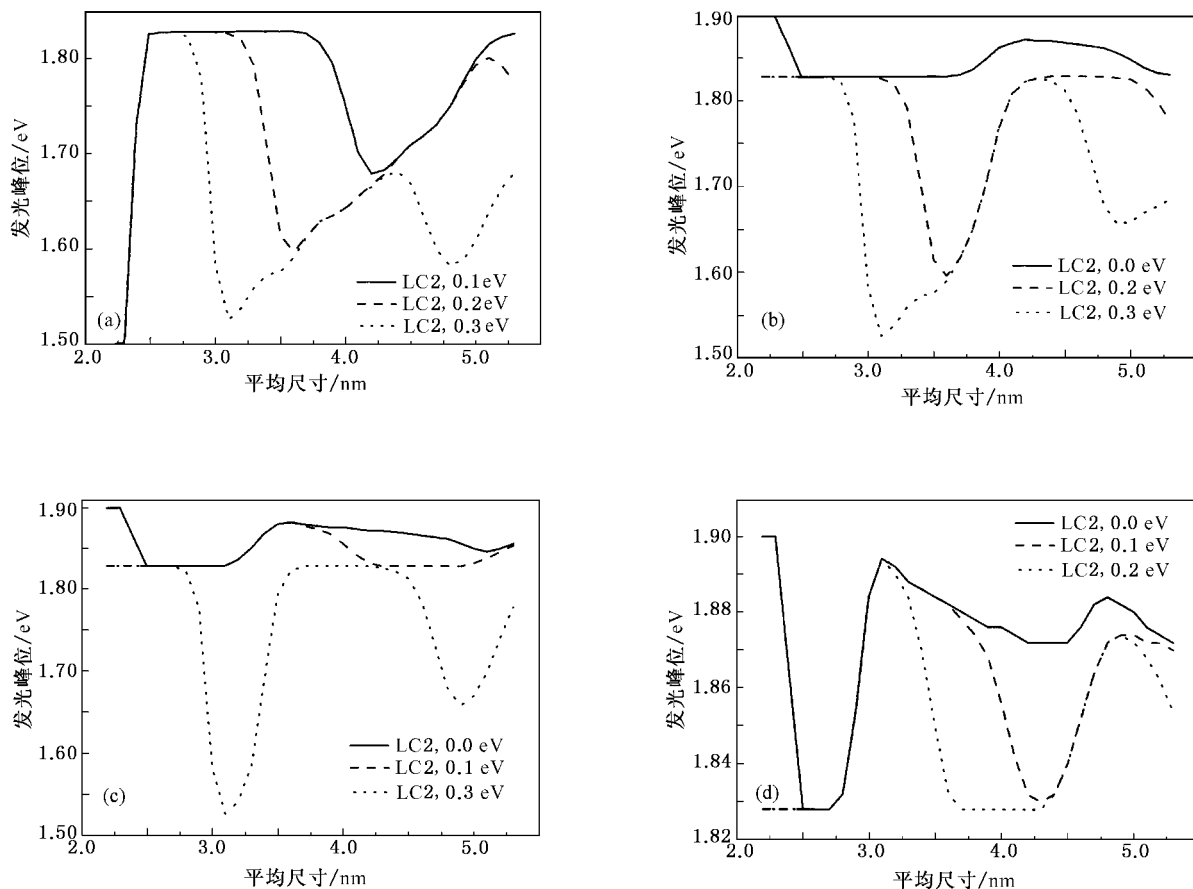


图5 纳米硅发光峰位与尺寸的关系 (a) LC1 = 0.0 eV ,(b) LC1 = 0.1 eV ,(c) LC1 = 0.2 eV ,(d) LC1 = 0.3 eV

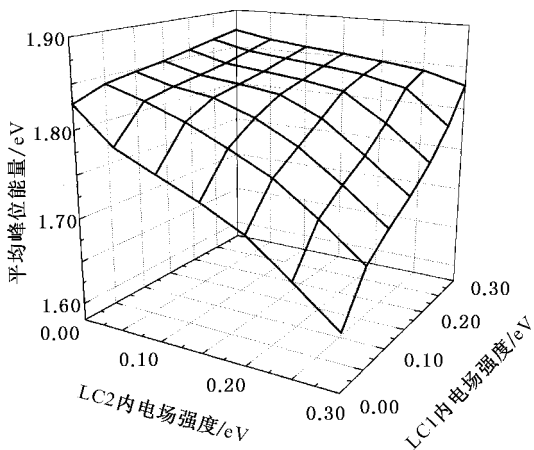


图6 平均能量与内电场强度的关系

强度的变化紧密联系. 发光中心 LC1 和 LC2 的峰位能量是不同的. 作为 LC1 和 LC2 两种发光中心光谱的叠加, 总的 PL 谱的峰位能量取决于 LC1 和 LC2 的相对 PL 强度, 但总是位于两者的发光峰位之间. 而内电场的存在使得发光中心的辐射发光强度降

低, 也就降低了相应发光中心的相对 PL 强度, 这一点可从图 6 更清楚地反映出来. 图 6 是纳米硅发光峰位对尺寸的平均值与内电场强度的关系曲面. 由图 6 我们可以看出, LC1 内电场强度增大的时候, 平均能量也随之增大, LC2 内电场强度增大的时候, 平均能量则随之减小. 这样就很容易理解上述的曲线分析. 当 LC1 上的内电场较大时, 相应的 LC1 相对 PL 强度较小, 因此总 PL 谱中的 LC1 的分量相对减小, 从而使得平均能量向 LC1 的峰位能量偏移. 相反, 如果 LC2 上的内电场较大, 则平均能量向着 LC2 的峰位能量偏移.

5. 结 论

通过计算分析纳米硅的 PL 特征与发光中心间内电场的关系, 发现纳米硅与发光中心间的内电场对载流子复合率及峰位振荡有着十分重要的影响. 对于存在发光中心的纳米硅, 在 2—5 nm 的尺寸范围内, 其发光中心上的载流子复合概率远大于内部

复合概率(10^4-10^{11})。因此,发光中心上的载流子复合在纳米硅 PL 效应中占主导地位。同时,发光中心与纳米硅粒子间的内电场对于纳米硅的发光峰位振荡有着显著的影响。发光中心与纳米硅粒子间内

电场的存在,会显著减小纳米硅粒子的内部发光效率以及外部相应发光中心上的发光强度,正是这种效应使得纳米硅 PL 谱的峰位随纳米晶粒尺寸变化而发生复杂的非周期性振荡。

- [1] Canham L T 1990 *Appl. Phys. Lett.* **57** 1046
- [2] Wang Q M 2002 *Progress in Physics* **22** 359 (in Chinese) [王启明 2002 物理学进展 **22** 359]
- [3] Lu Z H , Lockwood D J , Baribeau J M 1995 *Nature* **378** 258
- [4] Wai L N , Lourenco M A , Gwillam R M 1997 *Nature* **387** 686
- [5] Pavese L , Negro L D , Mazzoleni C *et al* 2000 *Nature* **408** 440
- [6] Qin G G , Jia Y Q 1993 *Solid State Commun.* **86** 559
- [7] Huang C J , Tang Y , Wang Q M *et al* 2000 *Appl. Phys. Lett.* **77** 2852
- [8] Proot J P , Delerue C , Allan G 1992 *Appl. Phys. Lett.* **61** 1948
- [9] Lehman V , Gosele U 1991 *Appl. Phys. Lett.* **58** 865
- [10] Koch F , Petrova-Koch V , Muschik T 1993 *J. Lumin.* **57** 271
- [11] Prokes S M 1993 *Appl. Phys. Lett.* **62** 3244
- [12] Qin G , Qin G G 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 2572
- [13] Ma S Y , Qin G G *et al* 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1580 (in Chinese) [马书懿、秦国刚等 2001 物理学报 **50** 1580]
- [14] Lin J , Tsukune A , Qin G G *et al* 1998 *Phys. Rev. B* **57** R2045
- [15] Glinka Y D , Lin S H , Chen Y T *et al* 2000 *Appl. Phys. Lett.* **77** 3968
- [16] Heikkila L , Kuusela T , Hedman H T 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 2179
- [17] Xiao Z S , Xu F *et al* 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 164 (in Chinese) [肖志松、徐 飞等 2001 物理学报 **50** 164]
- [18] Yuan F C , Zong W H *et al* 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2487 (in Chinese) [袁放成、宗婉华等 2001 物理学报 **50** 2487]
- [19] Prokes S M , Glembocki O J 1994 *Phys. Rev. B* **49** 2238
- [20] Zhang S L *et al* 1995 *Phys. Rev. B* **51** 11194
- [21] Qin G G , Song H Z , Zhang B R *et al* 1996 *Phys. Rev. B* **54** 2548
- [22] Chang I M , Chen Y F 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 3514
- [23] Harper J , Sailor M J 1997 *Langmuir* **13** 4652
- [24] Wang S H , Liao L K , Qin G *et al* 2001 *Phys. Lett. A* **279** 261
- [25] Wang S H , Liao L K , Qin G Y *et al* 2000 *Commun. Theor. Phys.* **34** 593
- [26] Bockelmann U , Bastard G 1990 *Phys. Rev. B* **42** 8947
- [27] Benisty H , Sotomayor-Torres C M , Weisbuch C 1991 *Phys. Rev. B* **44** 10945
- [28] Qin G 1995 *Solid State Commun.* **95** 483

Effect of inner electric field on the photoluminescence spectrum of nanosilicon^{*}

Huang Kai Wang Si-Hui Shi Yi Qin Guo-Yi Zhang Rong Zheng You-Dou

(*Department of Physics , State Key Laboratory of Solid State Microstructures , Nanjing University , Nanjing 210093 , China*)

(Received 9 July 2003 ; revised manuscript received 19 August 2003)

Abstract

Based on the quantum confinement-luminescence center model , the relation between the inner electric field (IEF) and the photoluminescence (PL) character is calculated . Results show that the IEF between nanosilicon and luminescence centers (LCs) can have a strong effect on the carrier recombination rate and the spectrum peak position swinging . In the range from 2 to 5 nm , the carrier recombination rate at the LCs is much bigger than the rates of recombination inside the nanosilicon . And due to the presence of IEF between nanosilicon and LCs , the PL intensity at the LCs and inside nanosilicon will reduce remarkably .

Keywords : inner electric field , nanosilicon , photoluminescence , quantum confinement-luminescence center

PACC : 7855 , 7125W

^{*}Project supported by the Special Foundation for State Major Basic Research Program (Grant No. G2001CB3095) and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 60206001 , 60290084 , 60225014).