Казахский национальный университет им. аль-Фараби

Профильная школа

**Научно-исследовательская работа**

**«Исследования морфологии и фотолюминесценции полупроводниковых наноструктур»**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **Выполнила**: |  | Рзалиев Дамир, Бейсенова А.,  Батесов А., Демежанов А., Нурмухаммед Е.  Ученики 11 класса |
| **Руководитель**: |  | Искаков Б.А.,  учитель физики |
| **Научный консультант**: |  | Кожагулов Е.Т.,  докторант PhD,  преподаватель кафедры физики твердого тела и нелинейной физики физико-технического факультета КазНУ им. аль-Фараби |

г. Алматы

2019 г.

**СОДЕРЖАНИЕ**

**Введение**………………………………………………………………………………..3

**Глава 1. Нанокластерные полупроводниковые пленки**…………………………4

* 1. Нанотехнология и наноэлектроника ……………..……………………………….4
  2. Полупроводники ……………………………………………………………...........4

1.3\_Наноструктурированные материалы……………………………………………..5

* 1. Зондовая микроскопия ……………….....................................................................6
  2. Фрактальное строение нанокластерных полупроводников……………………...7
  3. Фотолюминесценция полупроводниковых наноструктур………………………8

**Глава 2. Теоретические основы исследования** …………………………………...9

2.1 Фрактальные размерности самоподобных

и самоаффинных множеств……………………………………………................9

2.2 Уравнение фрактальной эволюции меры………………………………………..10

2.3 Реконструкция динамики сложных систем

по последовательности данных…………………………………………………..11

2.4 Оптические процессы в наноструктурированных пленках…………………….11

**Глава 3. Результаты исследования и их обсуждение**……………………………12

3.1 Исследование морфологии нанокластерных поверхностей……………………12

3.2 Влияние структуры нанокластерных пленок на спектры

фотолюминесценции………………………………………………………………17

**Заключение**……………………………………………………………………...........19

**Список использованной литературы**……………………………………………..20

**ВВЕДЕНИЕ**

В последние годы в связи с расширением сферы применения наноструктурированных полупроводников в науке и технике изучение их физических свойств является одной из наиболее актуальных научных задач (под наноструктурами понимают структуры, имеющие размеры до 100 нанометров). Полупроводники, содержащие наноструктуры, являются перспективным материалом для целей создания новых быстродействующих устройств вычислительной техники, эффективных приборов оптоэлектроники и фотоники. Прогресс в развитии полупроводниковой техники, переход от ставшей уже традиционной микроэлектро­ники к наноэлектронике требуют глубокого и всестороннего исследования фи­зики процессов в наноструктурированных полупроводниках. Важно, что изменяя геометрические размеры и конфигурации наноструктурированных систем, можно управлять свойствами самой системы. Таким образом, открывается широкая возможность управления параметрами структур и, следовательно, и их физическими свойствами. Создание нанотехнологий требует знания физических свойств наноматериалов, имеющих структуры с квантовыми и фрактальными свойствами. Основным отличием наноструктур является не только малость (порядка нанометров) их размеров, но и зависимость геометрических (длина, площадь, объем) и физических характеристик от масштаба измерения. Причиной этого является нерегулярность их формы, вследствие чего геометрические и физические меры нелинейным (степенным) образом зависят от масштаба измерения. Для практических приложений нелинейные уравнения, описывающие наноструктуры, анализируются численно, поэтому использование компьютерного моделирования в создании нанотехнологий является необходимостью.

Свойства наноструктур неоднозначны, поэтому только одним физическим экспериментом практически невозможно создать эффективную и надежную технологию. Дорогостоящие экспериментальные исследования не будут эффективными, если их не обосновывать и не описывать теоретическими и компьютерными моделями. В связи с этим актуальным вопросом является теоретический анализ и компьютерное моделирование физических (электрофизических, оптических и т.д.) свойств наноструктурированных полупроводников.

Целью настоящей работы является исследование морфологии поверхностей наноструктурированных полупроводниковых пленок на основе применения фрактальных представлений к описанию распределения в них носителей заряда (электронов и дырок) и примесей, а также спектров фотолюминесценции этих пленок, изучение влияния структуры нанокластерных пленок на их спектры фотолюминесценции. Исследования имеют теоретический характер, для их проведения используется компьютерное моделирование в среде Matlab.

**ГЛАВА 1**. **НАНОКЛАСТЕРНЫЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ ПЛЕНКИ**

**1.1 Нанотехнология и наноэлектроника**

Термин «*нанотехнология*» впервые был введен в 1974 г. Норио Танигучи [1] как «технология производства, позволяющая достигать сверхвысокую точность и ультрамалые размеры порядка 1 нм». Под влиянием книги Эрика Дрекслера [2] под нанотехнологией в 80-90-ые годы двадцатого века стали понимать создание различных устройств из отдельных молекул. В 1987 г. Альберт Франкс дал следующее определение понятию «нанотехнология»: "Нанотехнология – это производство с размерами и точностями в области 0.1-100 нм" [3].

В нанотехнологии выделяются области, связанные с конечными или промежуточными продуктами – это наноматериалы, наноструктуры, наноустройства. Впервые концепция наноматериалов была сформулирована Г. Глейтером [4], предложившего такие термины, как нанокристаллические, наноструктурые, нанокомпозитные материалы. К исследованию свойств наноматериалов подключились научные коллективы ряда университетов и исследовательских лабораторий. Накопление информации о свойствах наноматериалов начало развиваться лавинообразно. Ежегодно проводятся многочисленные симпозиумы, семинары, конференции по этой тематике.

На базе наноструктурированных материалов создаются новые компактные быстродействующие приборы электроники, такие, как наноэлектронные транзисторы, солнечные элементы, лазеры нового поколения и т.д. За последние годы технология полупроводниковых материалов достигла высокой степени совершенства. Квантовый характер явлений в наноструктурах приводит к тому, что создаваемые на их основе электронные приборы основываются на принципиально иной идеологии по сравнению с традиционными приборами микроэлектроники. Возникло новое направление в физике, технике и технологии полупроводников – *наноэлектроника*.

Таким образом, в наши дни происходит качественный скачок – переход от ставшей уже традиционной микроэлектроники к наноэлектронике. Поскольку большое количество современных наноэлектронных и оптоэлектронных приборов основаны на полупроводниковых структурах, одним из актуальных вопросов современной физики полупроводников является вопрос изучения процессов в наноструктурированных полупроводниковых пленках.

**1.2 Полупроводники**

Основным материалом наноэлектроники являются полупроводники, представляющие собой широкий класс материалов, в кото­рых концентрация подвижных носителей заряда ниже концентрации атомов, но может меняться под действием температуры, освещения, небольшого коли­чества примесей. Полупроводники представляют собой материалы с шириной запрещенной зоны между нулем и примерно 3 эВ. Без теплового движения (вблизи абсолютного нуля) полупроводники являются изоляторами. Удельная электропроводность полу­проводников лежит в диапазоне 103 < *σ* ≤ 10-9 Ом-1·см-1  [5].

Полупроводники можно классифицировать по различным признакам, например, по агрегатному состоянию (твердые и жидкие); по структуре (кристаллические и некристаллические); по физическим свойствам (магнитные и сегнетоэлектрические); по химическому составу (элементарные, соединения, органические).

К полупроводниковым материалам относится большинство минералов, не­металлические элементы IV, V, VI групп периодической системы Менделеева, неорганические соединения (оксиды, сульфиды), некоторые сплавы металлов, органические красители. В электронике в основном используются твер­дотельные структуры, состоящие из элементарных полупро­водников (*Ge*, *Si*) или полупроводниковых соединений типа *Ge-Si*, *A*3*B*5 (*GaAs*, *InSb*), *A*2*B*6 (*CdS*), окислы (*CuO*, *CuO*2, *ZnO*), слоистые полупроводники (*PbI*2 , *MoS*2, *GaSe*).

Полупроводники подразделяются на собственные и примесные. Беспри­месный и бездефектный полупроводник с идеальной кристаллической решет­кой представляет собой собственный полупроводник. Идеальный собственный полупроводник при температуре, равной абсолютному нулю, обладает свойст­вами изолятора. По мере повышения температуры в кристалле возникает коле­бательное движение атомов решетки. Для описания этого движения И.Е. Таммом было введено понятие фонона как квазичастицы, представляющей собой квант энергии упругих колебаний кристаллической решетки.

Проводимостью собственного полупроводника можно управлять. С этой целью вводят примеси, которые могут локально изменять тип проводимости полупроводника. Примеси в полупроводниках электронного типа (*n*-типа) яв­ляются донорными, а в полупроводниках дырочного типа (*p*-типа) – акцептор­ными. В полупроводнике *n*-типа проводимости основными носителями явля­ются электроны, а в полупроводнике *p*-типа проводимости – дырки.

**1.3\_Наноструктурированные материалы**

Наноструктурированный материал – вещество, находящееся в твердом состоянии, полностью или частично состоящее из структурных элементов (частиц, зерен, слоев и т.д.) с характерными размерами от нескольких нанометров до сотен нанометров. Эти структурные элементы называются наноструктурами (нанокластерами), и могут содержать до тысяч атомов.

С точки зрения математики приставка «нано» означает 10-9. Но понятие «наномасштаб» имеет несколько иной смысл. Под наномасштабом мы понимаем размеры до сотен ангстрем. Известно, что межатомное расстояние в твердом теле имеет порядок нескольких ангстрем. Таким образом, наномасштаб ограничен в твердом теле объемом, в котором могут поместиться атомы, число которых по порядку величины не превышает сотни.

Основными типами наноструктурированных материалов по размерности структурных элементов, из которых они состоят, являются нульмерные, одномерные, двумерные и трехмерные наноматериалы. Другими словами, наноструктурированные материалы могут содержать точечные, линейчатые, поверхностные и объемные наноструктуры. К нульмерным наноматериалам относятся нанокластерные материалы, в которых наночастицы изолированы друг от друга. Одномерные наноматериалы представляют собой нановолоконные материалы. К двумерным наноматериалам относятся пленки (покрытия) нанометровой толщины. К трехмерным наноматериалам относят образцы, содержащие объемные структуры, имеющие размеры в пределах наномасштаба.

При переходе к наномасштабам на первый план выходят квантовые свойства рассматриваемых объектов. С позиций квантовой механики электрон (как и другие частицы) может быть представлен волной. Если в микроэлектронных приборах поведение электрона определялось поведением элементарной частицы, имеющей массу и заряд, то в наноэлектронных приборах поведение электрона определяется его волновыми свойствами. Вообще, согласно известной гипотезе де Бройля, любая частица обладает волновыми свойствами и имеет длину волны, определяемую соотношением , где  ̶ постоянная Планка,  ̶ масса электрона,  ̶ ее скорость. Характерно, что размеры нанокластеров в целом сопоставимы с длиной волны света, что является причиной того, что наноструктуры обладают специфическими оптическими свойствами, определяемыми самими типами наноструктур.

Другими словами, морфология (рельеф) поверхности наноструктурированных материалов определяет физические (в частности, оптические) свойства наноматериала.

**1.4 Зондовая микроскопия**

В настоящее время различными научными группами широко проводятся исследования наноструктурированных полупроводниковых материалов, что, как было сказано выше, связано с расширением области их применения в электронике. Изучаются различные физические свойства полупроводников – механические, оптические и т.д., представляет также интерес изучение морфологии (рельефа) их поверхностей при помощи современных микроскопов.

В предыдущем пункте было отмечено, что морфология поверхности полупроводниковой пленки определяет физические свойства вещества. Исследовать морфологию пленок, содержащих наноструктуры, возможно при помощи современных видов микроскопии. К современной микроскопии относятся зондовые виды микроскопии (в них используется нанометровый зонд для сканирования поверхности образца): сканирующая туннельная, атомно-силовая микроскопия и т.д. При помощи таких микроскопов можно получать снимки поверхностей полупроводниковых пленок с высоким разрешением – до нескольких ангстрем. Известно, что порядок межатомного расстояния в твердом теле также имеет порядок нескольких ангстрем, таким образом, использование современных микроскопов позволяет получать изображения морфологии поверхностей пленок с высоким разрешением.

На рисунке 1 показана фотография зондового сканирующего микроскопа INTEGRA SPECTRA, находящегося в Нанотехнологической лаборатории открытого типа при КазНУ им. аль-Фараби (г. Алматы).



Рисунок 1. Зондовый сканирующий микроскоп INTEGRA SPECTRA

Зондовые микроскопы были разработаны сравнительно недавно: впервые фотографию поверхности с четким изображением на ней атомарных структур получили при помощи сканирующего туннельного микроскопа, за это достижение двоим ученым – Биннигу Р. и Рореру Г. – была присуждена в 1986 году Нобелевская премия.

**1.5 Фрактальное строение нанокластерных полупроводников**

Исследования, проведенные при помощи зондовой мик­роскопии, показывают, что полупроводниковые пленки содержат нанокластеры. Так, на рисунке 2(а) приведена фотография поверхности вертикальных кремниевых нанонитей, полученная при помощи сканирующего туннельного микроскопа [6]. Квантовые нити представляют собой полупроводниковые структуры, в которых движение носителей заряда в двух направлениях резко ограничено. На рисунке 2(b) приведено изображение наноструктур *GeSn*, полученное при помощи сканирующего туннельного микроскопа. На рисунке 2(с) показана морфология поверхности гидрогенизированного кремния, содержащего квантовые точки. Квантовая точка – это нанокластер размером обычно до 100 нм, внутри которого движение электрона ограничено по всем трем измерениям. На рисунке 2(d) показано изображение графена (одиночного слоя атомов углерода), на котором отчетливо заметно сложное строение нанокластеров.

Полупроводниковые пленки с нанокластерным строением являются иерархически самоподобными, т.е. их можно рассматривать как фрактальные объекты [10]. Термин «фрактал» был введён Бенуа Мандельбротом в 1975 году и получил широкую популярность с выходом в 1977 году его книги «Фрактальная геометрия природы». Вообще фрактал – это объект, часть которого в каком-то смысле подобна целому объекту [11]. Исследование фрактальных объектов – новое направление в современной науке.

|  |  |
| --- | --- |
| (a) | (b) |
| (c) | (d) |

Рисунок 2. Морфология поверхностей нанокластерных полупроводников:

(a) вертикальные кремниевые нанонити [6]; (b) наноструктуры *GeSn* [7];

(c) квантовые точки гидрогенизированного кремния [8];

(d) нанокластеры графена со сложной внутренней структурой [9].

В последние годы было проведено множество исследований фрактальной структуры поверхностей [11]. Эти исследования применяют весь спектр методов физики и химии – от молекулярных поверхностей белков до взлетных полос аэродромов. В качестве фрактальных рассматривались различные объекты. Например, была исследована шероховатость поверхностей разнообразных объектов – от обшивки супертанкеров и бетонных взлетных полос до поверхностей суставов, молекулярных поверхностей белков и шлифованных металлических поверхностей. Были сделаны выводы о том, что эти поверх¬ности являются фрактальными. В настоящее время известно также, что поверхности тел с нанокластерным строением также могут рассматриваться как фракталы.

**1.6 Фотолюминесценция полупроводниковых наноструктур**

Под фотолюминесценцией понимают свечение, возбуждаемое в среде светом разной длиной волны. Фотолюминесценция получила широкое применение. Ежегодно изготавливают сотни миллионов люминесцентных ламп; она в разных формах вошла в военную технику; люминесцентный анализ получил широкое применение в самых разнообразных сферах науки, техники, сельского хозяйства, медицины. Результаты исследований показывают, что в фотолюминесценции соединений главную роль играют комплексы примесей, дефекты кристаллической решетки.

**ГЛАВА 2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ИССЛЕДОВАНИЯ**

**2.1 Фрактальные размерности самоподобных и самоаффинных множеств**

Как было отмечено выше, полупроводниковые пленки, имеющие нанокластерное строение, могут быть описаны как фрактальные объекты. Если при описании фрактального объекта число определяющих переменных больше еди­ницы и коэффициенты подобия по этим переменным различны, то такие фрак­тальные объекты называются самоаффинными. Распределение носителей заряда в наноструктурированных пленках является самоаффинным.

Для описания фракталов используется фрактальная размерность (размерность Хаусдорфа-Безиковича), которая определяется по формуле

. (1)

где  − размер ячеек, на которые разбита рассматриваемая область пространства,  − количество этих ячеек.

Согласно Б. Мандельброту, любое множество с нецелым значением  явля­ется фракталом. Можно также сказать, что фракталом называется множество, размерность Хаусдорфа-Безиковича которого строго больше его топологической размерности, т.е. количества параметров, которые необходимо задать, чтобы однозначно определить положение объекта в пространстве.

Фракталы имеют разнообразные свойства, проявляющиеся на разных масштабах измерения. Фрактальный объект является самоподобным, если характеризуется только одним значением коэффициента подобия по переменным, и самоаффинным, если несколькими. Полупроводниковые пленки из-за анизотропии их свойств имеют само­аффинное строение, т.е. характеризуются набором фрактальных размерностей. Фракталь­ные объекты могут быть образованы из точечных, линейчатых, поверхностных, объемных структур с топологическими размерностями . Фрактальную размерность n-мерного объекта запишем в виде

, , . (2)

Здесь  разность между фрактальной и топологической размерностью.

Различные комбинации  и  позволяют описать всевозможные фрактальные структуры, образуемые в пространстве. Значения параметра  определяются из следующих рассуждений [10, 12]. В качестве критериев самоаффинности и самоподобия примем следующие критерии самоорганизации:  и . Эти числа характеризуют устойчивые самоподобные и самоаффинные фрактальные множества, и могут быть использованы для описания морфологии поверхностей нанокластерных полупроводниковых пленок.

**2.2 Уравнение фрактальной эволюции меры**

Модели поверхностей полупроводниковых пленок, содержащих нано-структуры, могут быть построены на основе универсального отображения перемежаемости, описывающего эволюцию фрактальной меры [13-15]. Под мерой понимается любая аддитивная величина. Вообще аддитивность – это свойство величин по отношению к сложению, состоящее в том, что значение величины, соответствующее целому объекту, равно сумме значений величин, соответствующих его частям. Любая аддитивная величина по определению является мерой. При описании полупроводниковых пленок в качестве меры мы можем рассматривать концентрации носителей заряда (свободных электронов и дырок) и примесей. В этом случае уравнение фрактальной эволюции меры может быть записано в виде системы отображений следующем виде:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (3) |
|  |
|  |

Здесь  – неравновесные (фрактальные) концентрации электронов, дырок и примесей соответственно, – степень точности разрешения, – разность между фрактальной и топологической размерностями множеств электронов, дырок и примесей,  – равновесные (нефрактальные) концентрации носителей заряда и примесей, – знаковая функция. Заданием соответствующих значений параметров, входящих в систему (3), возможно моделирование различных типов наноструктур, в том числе квантовых точек и квантовых нитей.

**2.3 Реконструкция динамики сложных систем по одномерной последовательности данных**

В настоящей работе для построения морфологии поверхностей, содержащих квантовые нити, применен метод реконструкции динамического хаоса [14] по одномерной последовательности данных (метод Такенса). Таким образом, по одной известной реализации может быть восстановлена трехмерная картина хаотического явления.

В качестве реализации, к которой применяется этот алгоритм, выбирается зависимость концентрации электронов от пространственного шага, определяемая при помощи формул (3). Далее нужно развернуть исходную последовательность  в ряд наборов с последовательно возрастающими сдвигами, определенными как величины, кратные некоторой фиксированной задержке . Таким образом, мы можем записать следующий набор дискретных переменных:

 (4)

Результатом применения этого алгоритма является модель поверхности наноструктурированной тонкой пленки. Варьируя параметры, входящие в (3), возможно моделирование поверхностей с учетом их нанокластерного строения.

**2.4 Оптические процессы в наноструктурированных тонких пленках**

Теоретическое описание спектров фотолюминесценции, оптического поглощения, отражения и пропускания возможно на основе флуктуационно-диссипа­ци­онного соотношения для квантовых корреляционных функций плотности носи­телей заряда, что позволяет учесть нанокластерную структуру полупроводниковых пленок [14]. Флуктуации определены в виде неравновесных функций плот­ности распределения электронов, диссипация задана через равновесное распре­де­ле­ние фотонов.

При переходах в системе поглощаемая энергия диссипируется в тепло. Интенсивность фотолюминесценции  может быть определена уравнением:

, (5)

где ,  – эффективная масса экситона,  – уровни энергий зон проводи­мости и валентности,  – размер­ная постоянная, заданная для края поглощения,  – энергия оптических фононов,  – спектр мощ­ности колебаний носи­телей тока, зависящий от волнового числа.

**ГЛАВА 3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ**

**3.1 Исследование морфологии нанокластерных поверхностей**

В настоящей работе при помощи методов компьютерного моделирования в среде Matlab были получены модели морфологии поверхностей полупроводниковых пленок. Для этой цели был использован следующий алгоритм. Сначала на основе уравнений (3) были построены так называемые реализации (функции, подчиняющиеся некоторым закономерностям), представляющие собой в нашем случае зависимость концентрации электронов от пространственного шага. Результат построения такой реализации показан на рисунке 8(а). Реализация характеризует рельеф тонкой пленки в поперечном сечении. Как видно из рисунка 8(а), полученная компьютерным моделированием реализация содержит пики различной высоты, что соответствует приведенным выше экспериментальным данным по изучению рельефа поверхностей полупроводниковых тонких пленок. Затем, используя описанный выше метод Такенса, получаем трехмерные изображения поверхности пленки (рисунок 8 (b)).

|  |  |
| --- | --- |
| (а) | (b) |

Рисунок 8. Реализация (a) и модель поверхности (b)

поверхности полупроводниковой пленки.





На рисунках 9(a-c) показано влияние фрактальной размерности множеств электронов, дырок и примесей, задаваемой параметрами , на реализацию, а на рисунках 9(d-f) – на морфологию поверхностей. Числовые значения , использованные при расчетах, соответствуют устойчивым структурам [10]. Как видно из рисунка, увеличение значений параметров  приводит к более перемежаемому характеру распределения нанокластеров. Варьируя эти параметры, можно получить модели поверхностей с различной морфологией.

|  |  |
| --- | --- |
| (а) | (d) |
| (b) | (e) |
| (c) | (f) |

Рисунок 9. Влияние параметров  на реализацию (a)-(c) и морфологию поверхности полупроводниковой пленки (d)-(f).

(a), (d): 

(b), (e): 

(c), (f): 

Рисунок 10 характеризует влияние концентрации примесей в полупроводниковой пленке на ее рельеф поверхности и соответствующие реализации. Из рисунка видно, что даже незначительное изменение концентрации примесей заметно влияет на морфологию поверхностей полупроводников.

|  |  |
| --- | --- |
| (а) | (d) |
| (b) | (e) |
| (c) | (f) |

Рисунок 10. Влияние концентрации примесей на реализацию (a)-(c) и морфологию поверхности полупроводниковой пленки (d)-(f).

(a), (d): (b), (e): (c), (f): 

На рисунке 11 приведены реализация и модель поверхности полупроводниковой пленки, содержащей квантовые точки, полученная на основе указанных выше формул. Для квантовых точек должно быть , следовательно, .

|  |  |
| --- | --- |
| (а) | (b) |
| Рисунок 11. Реализация (a) и морфология (b) квантовых точек.  *С*n= *С*p= *С*a =0.9; *γn= γp= γa* =; *n0 = p0* = 1/4, *a0* = 1; *=* − 1. | |

На рисунке 12 приведена модель морфологии поверхности пленки, содержащей структуры в виде квантовых нитей. Нанонить характеризуется топологической размерностью  и размерностю фрактального объема , поэтому для нитевидной морфологии . Аналогично, топологическая размерность квантовых ям  Следовательно, разность между фрактальной и топологической размерностями .

|  |  |
| --- | --- |
| (а) | (b) |
| Рисунок 12. Реализация (a) и морфология (b) квантовых нитей.  *Сn*= *Сp*= *Сa* =0.9; *γn*= *γp*= *γa* =2.806; *n*0 = *p*0 =1, *a*0 =1; = -1. | |

|  |  |
| --- | --- |
| (a) | (b) |
| Рисунок 13. Реализация (a) и модель поверхности (b), содержащей квантовые ямы.  *Сn*= *Сp*= *Сa* =0.9; *γn*= 1.806; *γp*=1.567; *γa* =1.433; *n*0= *p*0 = 1/4, *a*0 =1;  *μ*= -1. | |

Картины, аналогичные микроскопическим снимкам поверхностей тонких полупроводниковых пленок, можно получить, варьируя значения параметров , . Как было показано выше, при помощи применяемого под­хода могут быть получены поверхности с различными типами структур.

Особый интерес представляет сопоставление результатов моделирования морфологии поверхностей пленок с экспериментом. Ниже приведены результаты сравнения экспериментальных данных по исследованию морфологии наноструктурированных поверхностей тонких пленок, полученных при по­мощи современных методов микроскопии, и результатов численного анализа по их моделированию.

В экспериментальной работе [17] исследованы структуры, представляющие собой квантовые точки *SiGe*, обогащенного германием. Обнаруженная с привлечением методов атомно-силовой микроскопии структура состоит из областей, латеральные размеры которых составляют (5010) нм, а высота составляет от 5 до 10 нм (рисунок 14(а)). На рисунке 14(b) приведена компьютерная модель морфологии такой поверхности, полученная численным анализом формул (3) и (4). Как видно из рисунка, поверхность пленки содержит структуры в виде квантовых точек различной высоты.

Экспериментальная работа [18] посвящена исследованию морфологии поверхности и оптических свойств квантовых нанонитей кремния. При помощи сканирующего электронного микроскопа авторами этой работы получена микрофотография поверхности кристаллического кремния, содержащего нитевидные наноструктуры (рисунок 15(а)). Справа от экспериментальной фотографии приведена модель этой поверхности (рисунок 15(b)). Так же, как и экспериментально полученное изображение, модель поверхности содержит структуры в виде квантовых нанонитей.

|  |  |
| --- | --- |
| (a) | (b) |

Рисунок 14. Изображения поверхности *SiGe*.

1. эксперимент [15]; b) результат моделирования: *Cn*=*Cp*=*Ca*=0.999; *µ*=-1; =0.25; =0.55; =3.342; =3.619; =3.547, 

|  |  |
| --- | --- |
| (a) | (b) |

Рисунок 15. Кремниевые квантовые нанонити.

1. эксперимент [16]; b) результат моделирования: *Cn*=*Cp*=*Ca*=0.99; *µ*=-1;=0.51; =1.01; =2.806; =2.618; =2.655, *τ* =15.

Как видно из рисунков 14 и 15, полученные теоретические модели качественно согласуются с соответствующими экспериментальными данными.

**3.2 Влияние структуры нанокластерных пленок на спектры фотолюминесценции**

На рисунках 16 и 17 показаны спектры фотолюминесценции, полученные численным анализом уравнений (3) и (5). Как видно из этих рисунков, спектры содержат осцилляции, что свидетельствует о наличии наноструктур в исследуемых полупроводниковых пленках.

Значения разности фрактальной и топологической размерностей множеств электронов, дырок и примесей  влияют на вид спектра фотолюминесценции нанокластерной пленки. Как видно из этого рисунка, увеличение значений параметров  приводит к уменьшению амплитуды осцилляций в спектре, а также к увеличению значения интенсивности фотолюминесценции.

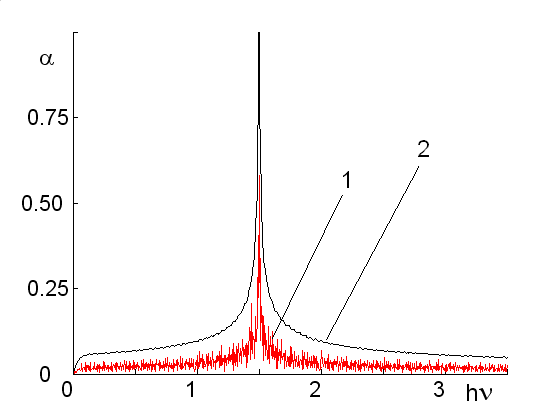


Рисунок 16. Влияние параметров  на спектр

фотолюминеценции квантовых нитей

*Eg*=1.5 эВ; *kT*=0.025 эВ; *n0= p0*=1/4, *a0*=1; 1 - 2.194; 2 - 2.567.

В работе также исследовано влияние ширины запрещенной зоны на вид спектра фотолюминесценции. Из рисунка 17 видно, что полупроводники с разной шириной запрещенной зоны характеризуются различными зависимостями интенсивности фотолюминесценции от энергии падающих фотонов.

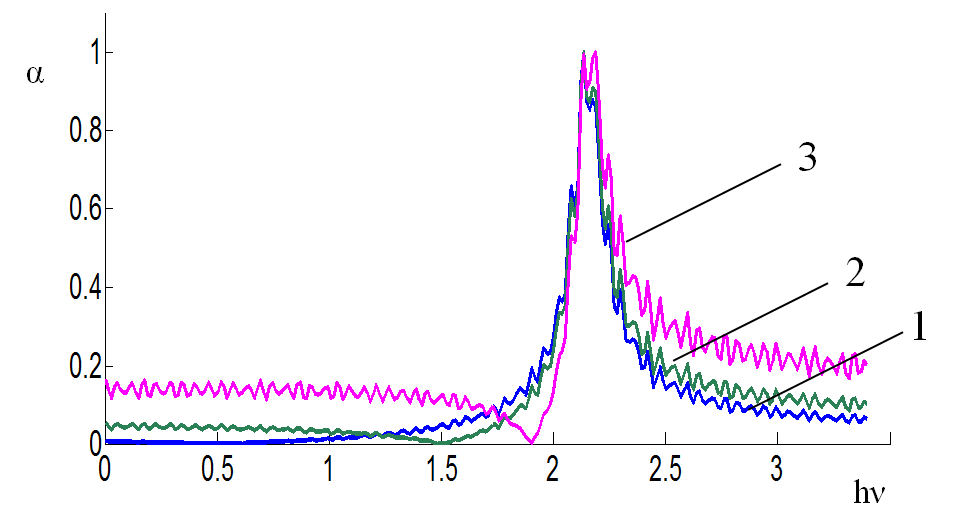


Рисунок 17. Влияние ширины запрещенной зоны на вид спектра фотолюминесценции

1 - *Eg=*0.5 эВ;2 *- Eg=* 1.5 эВ;3 *- Eg=*1.9 эВ;

*kT=*0.025 эВ*;* *0.806; n0= p0*=1/4, *a0*=1; *μ*= -1, 2.567.

Таким образом, структура нанокластерной пленки существенно влияет на вид спектров фотолюминесценции, а именно пленкам с различными нанокластерами и их взаимным расположением соответствуют разные спектры фотолюминесцеции. Следует отметить, что различия наблюдаются не только в форме спектральных кривых и положении пика, но и в интенсивности фотолюминесценции.

Следовательно, применение нанокластерных пленок определенной структуры в оптоэлектронных приборах может привести к управлению в них процессом фотолюминесценции: используя нанопленки с той или иной структурой, мы сможем изменять интенсивность фотолюминесценции, а также получать свечение того или иного цвета в зависимости от того, в какой области находится пик в спектре фотолюминесценции.

Применение этой методики на практике может привести к экономическому эффекту.

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

В ходе выполнения настоящей работы мною были изучены современные представления о строении нанокластерных полупроводников, а также основные принципы моделирования морфологии поверхностей наноструктурированных полупроводниковых тонких пленок, содержащих нанокластеры различных типов, на основе нового уравнения фрактальной эволюции меры, и их их спектров фотолюминесценции.

Для проведения громоздких расчетов с целью получения моделей фрактальных объектов целесообразно применять методы компьютерного моделирования. Поэтому мною были освоены некоторые методы компьютерного моделирования в среде Matlab и алгоритмы, позволяющие моделировать рельеф поверхности полупроводниковых пленок, содержащих нанокластеры.

При помощи моделирования в компьютерной среде Matlab на основе применения фрактальных представлений к описанию распределения электронов, дырок и примесей в полупроводниках были построены реализации и модели поверхностей полупроводниковых тонких пленок с различными типами наноструктур и их спектры фотолюминесценции.

Результаты моделирования сопоставлены с соответствующими экспериментальными данными, опубликованными в международном рейтинговом рецензируемом журнале «Физика и техника полупроводников». Экспериментальные данные качественно согласуются с полученными мною результатами численного анализа.

Сравнение экспериментальных и теоретических данных подтверждает правомерность применения фрактальных представлений о распределении электронов, дырок и примесей в полупроводниках к описанию морфологии и оптических поверхностей наноструктурированных полупроводниковых пленок.

Использование нанокластерных пленок с той или иной структурой позволяет изменять интенсивность фотолюминесценции, а также получать свечение пленки в том или ином диапазоне оптического спектра.

Результаты исследования могут быть применены для описания морфологии и оптических свойств наноструктурированных полупроводников, используемых в современной наноэлектронике, в частности, в оптоэлектронике и фотонике, а также для разработки рекомендаций по усовершенствованию оптоэлектронных приборов.

**СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ**

1 Taniguchi N. On the Basic Concept of 'NanoTechnology. - Proc. ICPE Tokyo. – 1974. - P. 18-23.

2 Drexler K.E. Molecular engineering: An approach to the development of general capabilities for molecular manipulation // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. -1981. - Vol. 78, No. 9. - P. 5275-5278.

3 Franks A. "Nanotechnology" // J. Phys. E: Sci. Instrum. 20. – 1987. - P. 1442-1451.

4 Gleiter H. Deformation of Polycrystals // Proc. Of 2nd RISO Symposium on Metallurgy and Materials Science. – Roskidle, RISO Nat. Lab. – 1981. - P. 15-21.

5 Щука А.А. Электроника. – СПб.: БХВ-Петербург, 2006. – 800 с.

6 Sivakov V.A., Voigt F., Berger A., Bauer G., Silke H. Christiansen roughness of silicon nanowire sidewalls and room temperature photoluminescence// Physical Review – 2010. – Vol. 82. – P. 125446-1-6.

7 Садофьев Ю.Г., Мартовицкий В.П. , Базалевский М.А., Клековкин А.В., Аверьянов Д.В., Васильевский И.С. Гетероструктуры Ge/GeSn, выращенные на Si (100) методом молекулярно-пучковой эпитаксии // Физика и техника полупроводников. – 2015. – Том 49, вып. 1. – С. 128-133.

8 Алпатов А.В., Вихров С.П., Рыбина Н.В. Исследование корреляционных параметров структуры поверхности неупорядоченных полупроводников с помощью методов двумерного DFA и средней взаимной информации // Физика и техника полупроводников. – 2015. – Том 49, вып. 4. – С. 467-471.

9 Tian Sh., Li L., Sun W., Xia X., Han D., Li J., Gu Ch. Robust adhesion of flower-like few-layer graphene nanoclusters // Scientific Reports. – 2012. – Vol. 2. – P. 1-7.

10 Zhanabaev Z.Zh. Information Properties of Self-Organizing Systems // Rep. Nat. Acad. of Science RK. − 1996. − No 5. − P. 14-19.

11 Федер Е. Фракталы. – Москва: Мир, 1991. - 254 с.

12 Z.Zh. Zhanabaev, Y.T. Kozhagulov, S.A. Khokhlov. Scale Invariance Criteria of Dynamical Chaos // International Journal of Mathematics and Physics. – 2013. – Vol. 4, № 2. – P. 29-37.

13\_Жанабаев З.Ж, Ахтанов С.Н. Универсальное отображение перемежаемости // Вестник КазНУ. - 2011. - №2 (37). - С. 15-25.

14 Zhanabaev Z.Zh., Grevtseva T.Yu. Physical Fractal Phenomena in Nanostructured Semiconductors // Reviews in Theoretical Science. – 2014. – Vol. 2, No 3. – P. 211-259

15 Zhanabaev Z.Zh., Grevtseva T.Yu., Ibraimov M.K. Morphology and Electrical Properties of Silicon Films with Vertical Nanowires // Journal of Computational and Theoretical Nanoscience. – 2016. – Vol. 13, No 1. – P. 1-4.

16 Nicolis G., Prigogine I. Exploring Complexity. An Introduction. – NewYork: W.H. Freeman and Company, 1990. – p. 342.

17\_Пархоменко Ю.Н.,Белогорохов А.И., Герасименко Н.Н., Иржак А.В., Лисаченко М.Г. Свойства самоорганизованных *SiGe*-наноструктур, полученных методом ионной имплантации // Физика и техника полупроводников. - 2004. - Т. 38, вып. 5. - С. 593-596.

18\_Гончар К.А., Осминкина Л.А., Сиваков В., Лысенко В., Тимошенко В.Ю. Оптические свойства нитевидных наноструктур, полученных металл-стимулированным химическим травлением пластин слабо легированного кристаллического кремния // Физика и техника полупроводников. - 2014. - Т. 48, вып.12. - С. 1654-1659.