

ВЛИЯНИЕ ГАЛОГЕНОВОЙ ПАССИВАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ НА ИЗЛУЧАТЕЛЬНЫЕ И БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНЫЕ ПЕРЕХОДЫ В КРЕМНИЕВЫХ НАНОКРИСТАЛЛАХ

*Н. В. Дербенёва, А. А. Конаков, В. А. Бурдов**

*Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского
603950, Нижний Новгород, Россия*

Поступила в редакцию 14 января 2019 г.,
после переработки 18 февраля 2019 г.
Принята к публикации 5 марта 2019 г.

Для нанокристаллов кремния размерами до 2.5 нм, на поверхности которых оборванные связи насыщались атомами хлора или брома, в рамках теории функционала плотности рассчитаны электронная структура, а также скорости излучательных электронно-дырочных переходов и оже-рекомбинации. Как излучательные, так и оже-процессы оказались сильно замедленными по сравнению со случаем водородного покрытия, что свидетельствует в пользу эффективности воздействия фактора «поверхностной химии» на электронные и оптические свойства нанокристаллов.

DOI: 10.1134/S0044451019080078

1. ВВЕДЕНИЕ

С тех пор как была обнаружена фотолуминесценция кремниевых нанокристаллов и пористого кремния при комнатной температуре [1, 2], уже почти три десятилетия нанокристаллический кремний является объектом пристального внимания как экспериментаторов, так и теоретиков. Первоначально основные усилия исследователей были сосредоточены на получении интенсивного излучения в кремниевых нанокристаллах, сопоставимого по своим характеристикам с излучением наноструктур на основе прямозонных полупроводников. Появляющиеся сообщения о достижении высоких скоростей излучательной межзонной рекомбинации в нанокристаллах кремния [3], получении в них оптического усиления [4–8], стимулированной эмиссии [9, 10], высокой квантовой эффективности фотонной генерации [11–13], безусловно, актуализируют исследования в этом направлении, которые активно продолжаются и в настоящее время.

Для достижения высоких скоростей электронно-дырочных излучательных переходов предлагались (и предлагаются) различные способы моди-

фикации электронной структуры нанокристаллов, которые позволили бы устранить, хотя бы частично, основное препятствие на этом пути — непрямозонность кремния. В частности, ранее использовались такие методы, как введение в нанокристаллы мелких примесей [14–17] или формирование нанокристаллов в различных диэлектрических матрицах [18–21], плазме [22], коллоидных растворах с последующей пассивацией поверхности различными лигандами [23, 24], что приводило к определенной перестройке энергетической структуры и влияло на излучательную способность нанокристаллов кремния [14–17, 25–32]. Применение этих методов представляется перспективным для получения требуемых характеристик исследуемых структур на основе нанокристаллического кремния. Более подробную информацию об электронных и оптических свойствах кремниевых кристаллитов можно найти в существующих обзорах [33–37] и в цитируемой там литературе.

В последние годы проявляется интерес к кремниевым нанокристаллам, связанный с альтернативным (в определенном смысле), по отношению к фотонике и оптоэлектронике, направлением их использования — фотовольтаике. В этом случае нанокристаллы кремния выступают в роли источника электронно-дырочных пар — экситонов, — генерируемых высоковольтными электронами или

* E-mail: vab3691@yahoo.com

дырками при их безызлучательной релаксации. Как показывают расчеты [38–40], процесс экситонной генерации в нанокристаллах кремния обладает высокими скоростями и является достаточно эффективным, что подтверждается экспериментально [41, 42]. Межзонная излучательная рекомбинация и оже-рекомбинация конкурируют с процессом экситонной генерации. Они снижают эффективность последнего, предоставляя возможность возбужденным носителям релаксировать по альтернативным каналам с достаточно высокими скоростями (особенно в случае релаксации через оже-процесс [31, 38, 43–46]) и потому крайне нежелательны.

В данной работе теоретически, в рамках теории функционала плотности, исследовано воздействие поверхностного галогенирования нанокристаллов кремния на межзонную излучательную рекомбинацию и оже-рекомбинацию. Рассчитаны электронная структура нанокристаллов кремния и скорости этих процессов в случае насыщения оборванных связей на поверхности атомами галогенов — хлора и брома. Для выявления эффекта галогеновой пассивации аналогичные расчеты проделаны также для нанокристаллов кремния, пассивированных водородом.

2. МЕТОД РАСЧЕТА

Мы провели расчеты для трех нанокристаллов, $\text{Si}_{59}\text{X}_{60}$, $\text{Si}_{163}\text{X}_{116}$, $\text{Si}_{317}\text{X}_{172}$, где $\text{X} = (\text{H}, \text{Cl}, \text{Br})$. Нанокристаллы строятся последовательным заполнением атомами кремния координационных сфер вокруг центрального атома кремния согласно строению кристаллической решетки объемного кремния. После заполнения атомами кремния последней координационной сферы все оборванные связи насыщаются атомами водорода, хлора или брома. Начальные длины связей кремний–водород или кремний–галоген, и их координация соответствуют молекулам SiX_4 . Полученные кристаллиты имеют группу симметрии T_d .

Для построенных нанокристаллов была проведена процедура оптимизации геометрии в рамках молекулярной механики с помощью метода универсального силового поля (universal force field, UFF) [47] с применением программы Avogadro [48]. Этот метод позволил быстро получить довольно хорошее начальное приближение геометрии нанокристалла. На рис. 1 в качестве примера изображен нанокристалл $\text{Si}_{59}\text{Br}_{60}$ после первичной релаксации методом UFF, «построенный» по указанной выше схе-

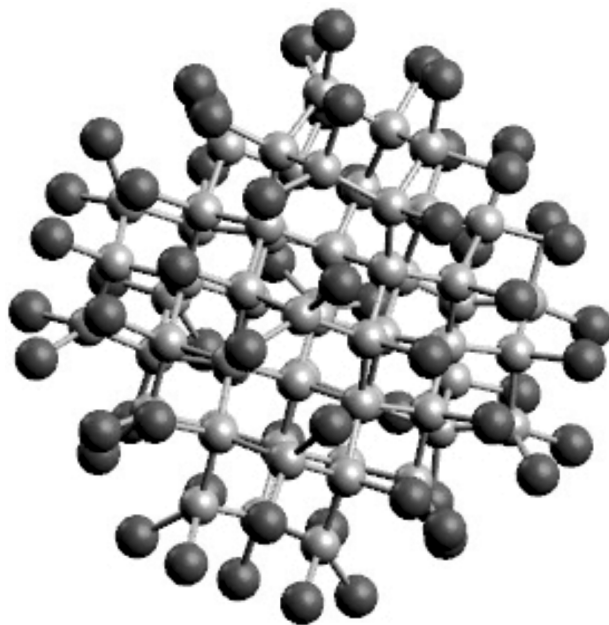


Рис. 1. (В цвете онлайн) Нанокристалл $\text{Si}_{59}\text{Br}_{60}$. Атомы кремния (светлые серые шарики) полностью заполняют 6 координационных сфер. Поверхностные оборванные связи насыщены атомами брома (темные красные шарики)

ме. Дальнейшая релаксация нанокристаллов выполнялась в рамках теории функционала плотности с использованием программных комплексов Gaussian 03 и GaussView 3 [49]. Для оптимизации геометрии структур данным методом был выбран базис гауссовых функций 6-31G(d, f), позволяющий наиболее точно описывать структуры с химическими элементами вплоть до Br, а также гибридный обменно-корреляционный функционал B3LYP [50, 51], дающий хорошее согласие с экспериментом для подобных систем. Релаксация кремниевых кристаллитов проводилась до тех пор, пока максимальные абсолютные значения сил Хеллмана–Фейнмана не достигали величины, меньшей или равной 10^{-4} эВ/Å.

Радиусы R нанокристаллов после релаксационной процедуры приведены в табл. 1. Их значения определялись как средние расстояния от центрального атома кремния до атомов водорода или галогена. Наличие атомов галогена на поверхности увеличивает размер нанокристалла, причем это увеличение оказывается настолько сильным, что радиус кристаллита становится даже больше, чем радиус нерелаксированного нанокристалла. Так, радиус нанокристалла $\text{Si}_{317}\text{H}_{172}$ до релаксации составлял 11.67 Å.

Таблица 1. Радиусы нанокристаллов кремния после релаксации

X	$R, \text{Å}$		
	$\text{Si}_{59}\text{X}_{60}$	$\text{Si}_{163}\text{X}_{116}$	$\text{Si}_{317}\text{X}_{172}$
H	6.69	9.04	11.20
Cl	7.17	9.79	11.75
Br	7.41	10.01	11.96

После процедуры релаксации проводился расчет электронной структуры нанокристаллов кремния на основе теории функционала плотности с применением программного комплекса Octopus [52], в котором реализован сеточный метод решения уравнений Кона – Шема [53] с использованием псевдопотенциалов. Такой подход позволил получить заметный выигрыш во времени вычислений по сравнению с методами полных потенциалов, которые реализованы, в частности, в комплексах типа Gaussian. Для определения шага по сетке и линейного размера суперъядчейки, в которой находится кристаллит, для каждого кристаллита проводились расчеты его полной энергии при различных значениях шага (с интервалом 0.01 Å) и размера (с интервалом 2 Å). Шаг уменьшался, а размер увеличивался до тех пор, пока разница двух последовательно полученных значений полной энергии не становилась меньше 0.01 эВ. Это значение позволяло получить достаточно высокую точность расчета за приемлемое время. В результате шаг по сетке был выбран равным 0.16 Å, а размер суперъядчейки был разным, в зависимости от размера нанокристалла.

В качестве граничного условия было выбрано обращение волновой функции в нуль на поверхности суперъядчейки. Для обменно-корреляционного функционала использовалось обобщенное градиентное приближение (GGA-PBE) [54]. Расчет возбужденных состояний был проведен в рамках нестационарной теории функционала плотности, разработанной для систем конечных размеров [55]. Как известно, использование модельных обменно-корреляционных функционалов при решении уравнений Кона – Шема приводит к появлению ошибки в расчете электронной структуры, связанной с наличием слагаемого, содержащего вклад от воздействия электрона самого на себя. Для исключения этого эффекта была использована поправка Пердью – Цунгера [56].

Таблица 2. Ширина НОМО–LUMO-щели нанокристаллов кремния

X	$\varepsilon_g, \text{эВ}$		
	$\text{Si}_{59}\text{X}_{60}$	$\text{Si}_{163}\text{X}_{116}$	$\text{Si}_{317}\text{X}_{172}$
H	2.99	2.22	1.85
Cl	1.70	1.30	1.10
Br	0.86	0.26	0.22

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Описанный выше метод применялся для расчета электронной структуры нанокристаллов. В частности, была вычислена ширина одночастичной щели ε_g , определяемая разностью энергий нижнего незаполненного состояния в зоне проводимости (LUMO) и верхнего заполненного состояния в валентной зоне (НОМО). Результаты расчета представлены в табл. 2. Видно, что галогеновое покрытие поверхности сильно меняет электронную структуру нанокристаллов по сравнению со случаем, когда оборванные связи на поверхности насыщаются атомами водорода — ширина одночастичной НОМО–LUMO-щели существенно уменьшается. Это особенно сильно проявляется в нанокристаллах, покрытых бромом.

Как было показано авторами ранее [57], атомы хлора или брома на поверхности нанокристаллов кремния не только выполняют роль пассиваторов оборванных связей, как это имеет место с атомами водорода, но и существенно перестраивают пространственное распределение электронной плотности. В частности, было обнаружено, что в случае водородного покрытия полная электронная плотность примерно равномерно распределяется по объему нанокристалла, в то время как при покрытии атомами галогенов она смещается к поверхности и там принимает наибольшие значения.

Также было показано, что в случае насыщения оборванных связей на поверхности нанокристалла кремния водородом электронные плотности НОМО- и LUMO-состояний не стремятся концентрироваться в области поверхности — они распределяются внутри нанокристалла, постепенно убывая к его границе. При этом имеет место сильное перекрытие электронных плотностей НОМО- и LUMO-состояний в координатном пространстве. Вместе с тем в обратном пространстве плотность вероятности НОМО-состояния концентрируется в окрестности Г-точки, в то время как для LUMO-состояния плот-

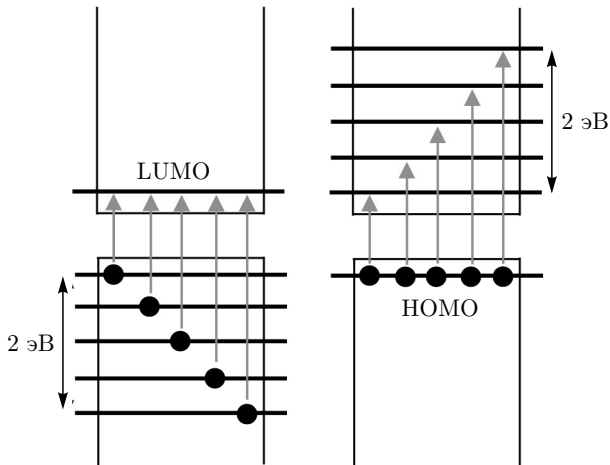


Рис. 2. Схема рассматриваемых излучательных электронно-дырочных переходов в нанокристалле кремния

ность вероятности локализуется вблизи X -точки, что свидетельствует о сохранении непрямозонности, присущей объемному кремнию, и в нанокристаллах.

В случае галогенового покрытия нанокристаллов кремния имеет место обратная картина. Электронные плотности НОМО- и LUMO-состояний довольно сильно перекрываются в обратном пространстве, что говорит об эффективном выпрямлении зонной структуры, однако пространственно НОМО- и LUMO-состояния теперь оказываются сильно разделенными — их волновые функции локализуются в разных областях нанокристалла. В частности, LUMO-состояние имеет наибольшую плотность в центральной области нанокристалла, которая убывает к границе (как и в случае водородной пассивации), а НОМО-состояние оказывается чувствительным к поверхностной модификации, существенно изменяя свое пространственное распределение и концентрируя электронную плотность вблизи атомов Cl или Br на поверхности. Такое пространственное разделение электронных плотностей НОМО- и LUMO-состояний, скорее всего, не позволит ускорить (по крайней мере, заметным образом) электронно-дырочные переходы.

Для проверки данного утверждения нами были рассчитаны скорости межзонной излучательной рекомбинации в нанокристаллах кремния, начиная от энергий фотонов, равных энергии ϵ_g НОМО–LUMO-перехода, и заканчивая энергиями, равными $\epsilon_g + 2$ эВ. При этом мы рассмотрели переходы двух типов: идущие из НОМО-состояния в различные состояния зоны проводимости и идущие из различных валентных состояний в LUMO-состояние, как показано схематично на рис. 2.

Скорость излучательного перехода между двумя заданными, начальным « i » и конечным « f », электронными состояниями может быть записана с использованием золотого правила Ферми в виде

$$\tau_R^{-1} = \frac{4e^2 \epsilon_{if} |\mathbf{p}_{if}|^2 \kappa \sqrt{\epsilon_{out}}}{3m_0^2 \hbar^2 c^3}, \quad (1)$$

где m_0 и $-e$ — масса и заряд свободного электрона, c — скорость света в вакууме. Параметры ϵ_{if} и $\mathbf{p}_{if} = \langle \psi_i | \hat{\mathbf{p}} | \psi_f \rangle$ представляют собой энергию перехода и матричный элемент оператора импульса, где $\psi_{i,f}$ — кон-шэмовские электронные орбитали начального и конечного состояний. Параметр κ корректирует величину амплитуды электрического поля в нанокристалле из-за разницы диэлектрических постоянных нанокристалла (ϵ) и окружающей его матрицы (ϵ_{out}). В рамках макроскопической картины нанокристалл представляет собой шар радиуса R с проницаемостью ϵ , находящийся в среде с проницаемостью ϵ_{out} . Поскольку все вычисления проводились для нанокристаллов в вакууме, положим $\epsilon_{out} = 1$. Тогда параметр κ определяется следующим образом [58]:

$$\kappa = \frac{9}{(2 + \epsilon)^2}.$$

Оставаясь в рамках макроскопической картины, следует положить ϵ равным его значению для объемного материала, т. е. $\epsilon = 12$ для кремния. В этом случае $\kappa = 0.046$.

Результаты расчета скоростей излучательных переходов в нанокристаллах $\text{Si}_{317}\text{X}_{172}$ представлены на рис. 3. Как и предполагалось, замена водородного покрытия на галогеновое приводит, в целом, к уменьшению скоростей переходов, причем в случае, когда покрывающим элементом является бром, это уменьшение становится более значительным. Действительно, в случае пассивации бромом, скорости переходов не превышают 10^5 с^{-1} ; в случае пассивации хлором верхняя граница значений скоростей составляет примерно 10^6 с^{-1} , что, в свою очередь, на порядок (или даже более) меньше, чем в случае водородного покрытия. Для нанокристаллов $\text{Si}_{59}\text{X}_{60}$ и $\text{Si}_{163}\text{X}_{116}$ картина оказывается полностью аналогичной, поэтому мы не приводим здесь данных для этих нанокристаллов, чтобы излишне не загромождать рисунок.

На рис. 3 можно также заметить, что переходы из НОМО-состояния в состояния, расположенные по энергии выше НОМО–LUMO-щели, обладают, в целом, несколько большими скоростями, чем переходы из состояний ниже НОМО–LUMO-щели в

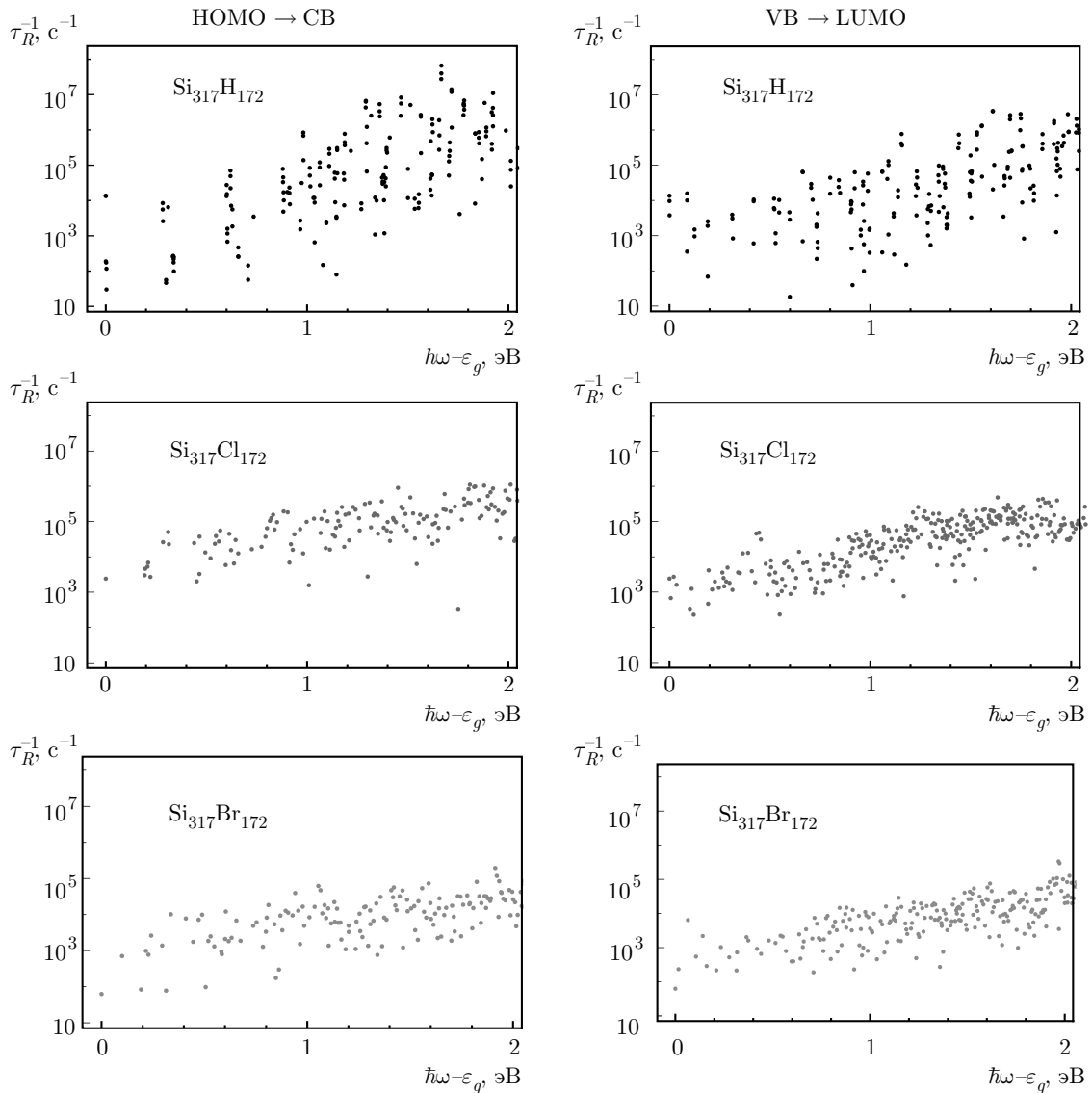


Рис. 3. Скорости излучательной рекомбинации для переходов из НОМО-состояния (слева) в зону проводимости (CB) и из валентной зоны (VB) в LUMO-состояние (справа)

LUMO-состояние. Это означает, что при поглощении нанокристаллом фотона заданной частоты, превышающей ширину НОМО–LUMO-щели, экситон с высокоэнергетичным электроном будет рождаться с несколько большей вероятностью, чем экситон с высокоэнергетичной дыркой.

В случае, когда в нанокристалле возбуждается более одной электронно-дырочной пары, что может иметь место, например, при высоком уровне лазерной накачки или в ходе релаксации высоковозбужденных носителей, в системе помимо излучательной рекомбинации возможна также оже-рекомбинация. Для ее реализации необходимо наличие как мини-

мум двух электронов в зоне проводимости и одной дырки в валентной зоне или одного электрона в зоне проводимости и двух дырок в валентной зоне. В первом случае говорят о *eeh*-процессе, а во втором — о *ehh*-процессе. Оба этих процесса схематично показаны на рис. 4. Рассчитывая далее скорости оже-рекомбинации, будем исходить из предположения, что в обоих случаях изначально как электроны, так и дырки находятся в своих основных (НОМО и LUMO) состояниях.

Скорость оже-процесса, так же как и скорость излучательной рекомбинации, может быть найдена с помощью золотого правила Ферми:

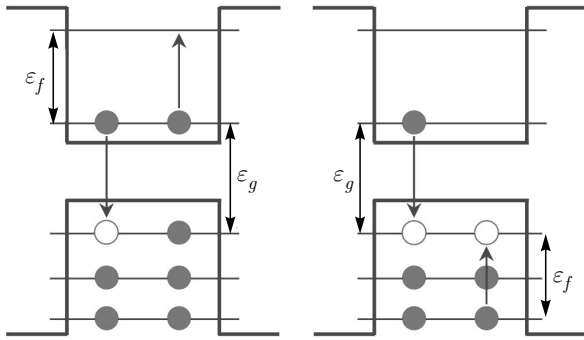


Рис. 4. Начальные состояния системы при оже-рекомбинации типов *eeh* (слева) и *ehh* (справа). Стрелками показаны переходы в конечные состояния

$$\tau_A^{-1} = \frac{2\Gamma}{\hbar} \sum_f \frac{|U_{if}|^2}{\Gamma^2 + (\varepsilon_f - \varepsilon_g)^2}, \quad (2)$$

где U_{if} — матричный элемент оператора двухчастичного кулоновского взаимодействия относительно двухэлектронных волновых функций начального и конечного состояний, записанных в виде произведений одноэлектронных кон-шэмовских-орбиталей. Дельта-функция заменена в выражении (2) лоренцианом с полушириной $\Gamma = 10$ мэВ, а по всем возможным конечным состояниям оже-электрона (или дырки) с энергией ε_f , показанной на рис. 4, проводится суммирование.

Потенциальную энергию кулоновского взаимодействия двух электронов можно представить в виде суммы двух частей — дальнодействующей и короткодействующей, подобно тому, как это было сделано в работе [31]. Дальнодействующая часть описывает экранированное прямое электрон-электронное взаимодействие, модифицированное поляризационными зарядами на границе нанокристалла, а короткодействующая часть — неэкранированное взаимодействие электронов на малых расстояниях (порядка борковского радиуса).

Расчитанные скорости оже-рекомбинации для *eeh*- и *ehh*-процессов представлены в табл. 3 для всех рассматриваемых здесь нанокристаллов. Как видно, скорости оже-рекомбинации во всех случаях достаточно высоки — они на несколько порядков превосходят скорости излучательной рекомбинации. Видно также, что модификация поверхности существенно сказывается на оже-переходах — их скорости меняются в некоторых случаях на порядок или даже более.

Как следует из табл. 3, в случае *eeh*-переходов, галогеновое покрытие практически всегда приводит к значительному замедлению оже-рекомбинации.

Таблица 3. Скорости оже-переходов *eeh*- и *ehh*-типов в рассматриваемых нанокристаллах

X	Тип перехода	$\tau_A^{-1}, \text{c}^{-1}$		
		Si ₅₉ X ₆₀	Si ₁₆₃ X ₁₁₆	Si ₃₁₇ X ₁₇₂
H	<i>eeh</i>	$7.8 \cdot 10^{11}$	$1.2 \cdot 10^{12}$	$3.3 \cdot 10^9$
Cl	<i>eeh</i>	$3.4 \cdot 10^9$	$2.1 \cdot 10^{11}$	$4.4 \cdot 10^9$
Br	<i>eeh</i>	$6.6 \cdot 10^{10}$	10^{12}	$1.5 \cdot 10^8$
H	<i>ehh</i>	$5 \cdot 10^{10}$	$4.7 \cdot 10^{11}$	$5.5 \cdot 10^{10}$
Cl	<i>ehh</i>	$2.7 \cdot 10^{11}$	$9.4 \cdot 10^{10}$	$3.1 \cdot 10^{10}$
Br	<i>ehh</i>	$1.9 \cdot 10^{11}$	$1.9 \cdot 10^{11}$	$7.8 \cdot 10^{11}$

Аналогичный эффект был обнаружен при расчетах скоростей оже-рекомбинации в нанокристаллах GaSb [59], на основании чего был сделан вывод о возможности контролируемого подавления оже-процесса за счет модификации поверхности. Для *ehh*-процесса подобная закономерность не просматривается. Для нанокристалла Si₅₉X₆₀ имеет место некоторое увеличение (в 4–5 раз) скорости перехода в случае галогенового покрытия. В нанокристалле Si₁₆₃X₁₁₆ происходит примерно такое же уменьшение скорости, а в нанокристалле Si₃₁₇X₁₇₂ покрытие хлором замедляет оже-переход, а покрытие бромом его ускоряет. В целом при *ehh*-процессе изменения скоростей оже-переходов за счет галогеновой пассивации не столь велики, как в случае *eeh*-процесса. Их скорости, в среднем, остаются примерно такими же, как и в случае водородной пассивации.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе были выполнены *ab initio* расчеты электронной структуры нанокристаллов кремния Si₅₉X₆₀; Si₁₆₃X₁₁₆; Si₃₁₇X₁₇₂, поверхность которых была полностью пассивирована атомами водорода, хлора или брома (X = H, Cl, Br). На основании полученных данных об электронном строении были найдены скорости излучательных межзонных переходов и оже-рекомбинации в этих нанокристаллах.

Как следует из выполненных расчетов, покрытие нанокристаллов галогенами существенно модифицирует их электронное строение и сильно влияет на излучательные и безызлучательные переходы. В частности, наличие галогенового покрытия приводит к концентрации валентных электронов в приповерхностной области, что, в свою очередь,

ведет к значительному сужению запрещенной зоны нанокристаллов и к резкому снижению скоростей электронно-дырочных излучательных переходов. Кроме того, расчеты обнаруживают снижение (на один–два порядка) темпа оже-рекомбинации в нанокристаллах кремния вследствие галогеновой пассивации в случае *eeh*-процесса. Замедление излучательных и оже-переходов, очевидно, можно рассматривать как позитивный фактор с точки зрения использования нанокристаллов кремния в фотовольтаике.

Финансирование. Работа выполнялась в рамках проектной части госзадания Министерства образования и науки Российской Федерации (проект № 3.2637.2017/4.6) и была поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (гранты №№ 18-32-20168, 18-32-00740) и грантом МК-6679.2018.2 Президента Российской Федерации для молодых кандидатов наук. Расчеты велись с использованием суперкомпьютерных комплексов «Лобачевский» [60] и «Ломоносов» [61].

Работа подготовлена по итогам XXXVIII Совещания по физике низких температур (НТ-38).

ЛИТЕРАТУРА

1. L. Canham, Appl. Phys. Lett. **57**, 1046 (1990).
2. H. Takagi, H. Ogawa, Y. Yamazaki, A. Ishizaki, and T. Nakagiri, Appl. Phys. Lett. **56**, 2379 (1990).
3. M. Sykora, L. Mangolini, R. D. Schaller, U. Kortshagen, D. Jurbergs, and V. I. Klimov, Phys. Rev. Lett. **100**, 067401 (2008).
4. L. Pavesi, L. Dal Negro, C. Mazzoleni, G. Franzo, and F. Priolo, Nature **408**, 440 (2000).
5. M. Cazzanelli, D. Navarro-Urrios, F. Riboli, N. Dalosso, L. Pavesi, J. Heitmann, L. X. Yi, R. Scholz, M. Zacharias, and U. Gosele, J. Appl. Phys. **96**, 3164 (2004).
6. L. Dal Negro, M. Cazzanelli, B. Danese, L. Pavesi, F. Iacona, G. Franzò, and F. Priolo, J. Appl. Phys. **96**, 5747 (2004).
7. K. Luterova, K. Dohnalova, F. Trojanek, K. Neudert, P. Gilliot, B. Honerlage, P. Malý, and I. Pelant, J. Non-Cryst. Sol. **352**, 3041 (2006).
8. B. M. Monroy, O. Cregut, M. Gallart, B. Honerlage, and P. Gilliot, Appl. Phys. Lett. **98**, 261108 (2011).
9. P. M. Fauchet, J. Ruan, H. Chen, L. Pavesi, L. Dal Negro, M. Cazzanelli, R. G. Elliman, N. Smith, M. Samoc, and B. Luther-Davies, Opt. Mater. **27**, 745 (2005).
10. M. H. Nayfeh, N. Barry, J. Therrien, O. Akcikir, E. Gratton, and G. Belomoin, Appl. Phys. Lett. **78**, 1131 (2001).
11. S. Miura, T. Nakamura, M. Fujii, M. Inui, and S. Hayashi, Phys. Rev. B **73**, 245333 (2006).
12. K. Potrick, T. Schmidt, S. Bublitz, C. Mühlig, W. Paa, and F. Huisken, Appl. Phys. Lett. **98**, 083111 (2011).
13. F. Sangghaleh, I. Sychugov, Z. Yang, J. G. C. Veinot, and J. Linnros, ACS Nano **9**, 7097 (2015).
14. M. Fujii, A. Mimura, S. Hayashi, and K. Yamamoto, Appl. Phys. Lett. **75**, 184 (1999).
15. V. A. Belyakov, A. I. Belov, A. N. Mikhaylov, D. I. Tetelbaum, and V. A. Burdov, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 045803 (2009).
16. K. Nomoto, T. C.-J. Yang, A. V. Ceguerra, T. Zhang, Z. Lin, A. Breen, L. Wu, B. Puthen-Veetil, X. Jia, G. Conibeer, I. Perez-Wurfl, and S. P. Ringer, J. Appl. Phys. **122**, 025102 (2017).
17. E. Klimesova, K. Kusova, J. Vacik, V. Holy, and I. Pelant, J. Appl. Phys. **112**, 064322 (2012).
18. T.-Y. Kim, N.-M. Park, K.-H. Kim, G. Y. Sung, Y.-W. Ok, T.-Y. Seong, and C.-J. Choi, Appl. Phys. Lett. **85**, 5355 (2004).
19. J. Klansin, O. Martya, J. Munguia, V. Lysenko, A. Vorobey, M. Pitaval, A. Cereyon, A. Pillonnet, and B. Champagnon, Phys. Lett. A **372**, 1508 (2008).
20. Д. И. Тетельбаум, А. Н. Михайлов, А. И. Белов, А. В. Ершов, Е. А. Питиримова, С. М. Планкина, В. Н. Смирнов, А. И. Ковалев, R. Turan, S. Yerci, T. G. Finstad, G. Foss, ФТТ **51**, 385 (2009).
21. A. A. Konakov and V. A. Burdov, J. Phys.: Condens. Matter **22**, 215301 (2010).
22. S. Zhou, Y. Ding, X. Pi, and T. Nozaki, Appl. Phys. Lett. **105**, 183110 (2014).
23. T. Zhou, R. T. Anderson, H. Li, J. Bell, Y. Yang, B. P. Gorman, S. Pylypenko, M. T. Lusk, and A. Selinger, Nano Lett. **15**, 3657 (2015).
24. G. M. Carroll, R. Limpens, and N. R. Neale, Nano Lett. **18**, 3118 (2018).
25. V. A. Belyakov and V. A. Burdov, Phys. Rev. B **79**, 035302 (2009).

26. Y. Ma, X. Chen, X. Pi, and D. Yang, *J. Phys. Chem. C* **115**, 12822 (2011).
27. Y. Ma, X. Pi, and D. Yang, *J. Phys. Chem. C* **116**, 5401 (2012).
28. R. Wang, X. Pi, and D. Yang, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 1815 (2013).
29. K. Dohnalova, A. N. Poddubny, A. A. Prokofiev, W. D. A. M. de Boer, C. P. Umesh, J. M. J. Paulusse, H. Zuilhof, and T. Gregorkiewicz, *Light: Sci. Appl.* **2**, e47 (2013).
30. A. N. Poddubny and K. Dohnalova, *Phys. Rev. B* **90**, 245439 (2014).
31. N. V. Derbenyova and V. A. Burdov, *J. Phys. Chem. C* **122**, 850 (2018).
32. N. V. Derbenyova and V. A. Burdov, *J. Appl. Phys.* **123**, 161598 (2018).
33. V. A. Belyakov, V. A. Burdov, R. Lockwood, and A. Meldrum, *Adv. Opt. Technol.* **2008**, 279502 (2008).
34. О. Б. Гусев, А. Н. Поддубный, А. А. Прокофьев, И. Н. Ясиевич, *ФТП* **47**, 147 (2013).
35. E. G. Barbagiovanni, D. J. Lockwood, P. J. Simpson, and L. V. Goncharova, *Appl. Phys. Rev.* **1**, 011302 (2014).
36. F. Priolo, T. Gregorkiewicz, M. Galli, and T. F. Krauss, *Nature Nanotechnol.* **9**, 19 (2014).
37. B. L. Oliva-Chatelain, T. M. Tichich, and A. R. Barron, *Nanoscale* **8**, 1733 (2016).
38. C. Sevik and C. Bulutay, *Phys. Rev. B* **77**, 125414 (2008).
39. G. Allan and C. Delerue, *Phys. Rev. B* **79**, 195324 (2009).
40. M. Govoni, I. Marri, and S. Ossicini, *Nature Photon.* **6**, 672 (2012).
41. A. J. Nozik, *Nano Lett.* **10**, 2735 (2010).
42. M. T. Trinh, R. Limpens, W. D. A. M. de Boer, J. M. Schins, L. D. A. Siebbeles, and T. Gregorkiewicz, *Nature Photon.* **6**, 316 (2012).
43. C. Delerue, M. Lannoo, G. Allan, E. Martin, I. Mihalescu, J. C. Vial, R. Romestain, F. Muller, and A. Bsiesy, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 2228 (1995).
44. M. Mahdouani, R. Bourguiga, S. Jaziri, S. Gardelis, and A. G. Nassiopoulou, *Physica E* **42**, 57 (2009).
45. N. V. Kurova and V. A. Burdov, *Semiconductors* **44**, 1414 (2010).
46. F. Pevere, I. Sychugov, F. Sangghaleh, A. Fucikova, and J. Linnros, *J. Phys. Chem. C* **119**, 7499 (2015).
47. A. K. Rappe, C. J. Casewit, K. S. Colwell, W. A. Goddard III, and W. M. Skiff, *J. Amer. Chem. Soc.* **114**, 10024 (1992).
48. M. D. Hanwell, D. E. Curtis, D. C. Lonie, T. Vandermeersch, E. Zurek, and G. R. Hutchison, *J. Cheminformatics* **4**, 17 (2012).
49. M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel et al., *Gaussian 03*, Revision A1, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA (2003).
50. A. D. Becke, *J. Chem. Phys.* **98**, 5648 (1993).
51. C. Lee, W. Yang, and R. G. Parr, *Phys. Rev. B* **37**, 785 (1988).
52. C. Alberto, H. Appel, M. Oliveira, C. A. Rozzi, X. Andrade, F. Lorenzen, M. A. L. Marques, E. K. U. Gross, and A. Rubio, *Phys. Stat. Sol. (b)* **243**, 2465 (2006).
53. W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, A1133 (1965).
54. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
55. M. E. Casida, in *Recent Developments and Applications of Modern Density Functional Theory*, ed. by J. M. Seminario, Elsevier Sci., Amsterdam (1996), p. 391.
56. J. P. Perdew and A. Zunger, *Phys. Rev. B* **23**, 5048 (1981).
57. Н. В. Дербенёва, А. А. Конаков, А. Е. Швецов, В. А. Бурдов, *Письма в ЖЭТФ* **106**, 227 (2017).
58. A. Thranhardt, C. Ell, G. Khitrova, and H. M. Gibbs, *Phys. Rev. B* **65**, 035327 (2002).
59. M. Califano, *J. Phys. Chem. Lett.* **9**, 2098 (2018).
60. *Суперкомпьютер «Лобачевский». Общая характеристика. Состав*, Нижегородский государственный университет, Нижний Новгород (2014).
61. V. Sadovnichy, A. Tikhonravov, V. Voevodin, and V. Opanasenko, in *Contemporary High Performance Computing: From Petascale Toward Exascale*, CRC Press, Boca Raton, USA (2013), p. 283.