

行政院原子能委員會
委託研究計畫研究報告

【富矽氮化物中矽量子點晶體生長之電腦模擬】
【Theoretical Simulation of the Silicon Quantum Dot Nucleation
Process in the Silicon-rich Silicon Nitride Samples】

計畫編號：972001INER063

受委託機關(構)：國立交通大學

計畫主持人：魏恆理

核研所參與人員：謝宏明、林俊甫、林奕君

聯絡電話：(03)-5712121 ext. 56583

E-mail address：hwitek@mail.nctu.edu.tw

報告日期：2008.11.30

中文摘要

矽量子點的大小可以改變價電子與導電帶能階間的能隙。本研究利用分子動力學方法模擬非晶態氮化矽薄膜中含矽量子點時能隙的變化，應用 DFTB 方法模擬薄膜由高溫(2273K)降至較低溫(773K)時，矽量子點由非晶態轉變為結晶態的過程。以原子徑向分布圖觀察晶相的改變以及計算費米能量以推估能隙的變化。模擬結果顯示含 1.0 nm 矽量子點的氮化矽薄膜結晶態的能隙比非晶態的能隙約大 0.8 eV。