

DOI: 10.17586/1023-5086-2024-91-06-39-46

УДК 53.043

# Плотность электронных состояний в нанокристаллах кремния в матрице $\text{SiO}_2$ и с пассивированной водородом поверхностью

Антон Владимирович Герт<sup>1✉</sup>, Алексей Владимирович Белолипецкий<sup>2</sup>,  
Иван Дмитриевич Авдеев<sup>3</sup>

Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

<sup>1</sup>anton.gert@mail.ioffe.ru

<https://orcid.org/0009-0009-2531-6662>

<sup>2</sup>alexey.belolipetskiy@mail.ioffe.ru

<https://orcid.org/0000-0003-1287-7793>

<sup>3</sup>ivan.avdeev@mail.ioffe.ru

<https://orcid.org/0000-0001-6941-3880>

## Аннотация

**Предмет исследования.** В работе рассматриваются вероятности оптических переходов в нанокристаллах кремния в диэлектрической матрице  $\text{SiO}_2$  и нанокристаллах, пассивированных водородом. **Цель работы.** Теоретическое исследование вероятности оптических переходов, сечения поглощения и плотности электронных состояний в нанокристаллах кремния с различным окружением, адаптация метода сильной связи для корректного описания пассивации оборванных связей кремния. **Метод.** В работе используется вариант метода сильной связи с учётом большого количества орбиталей s, p, d и s\* и взаимодействия между ближайшими соседями. **Основные результаты.** Рассчитана локальная плотность состояний электронов и дырок, вероятности оптических переходов и сечения поглощения в нанокристаллах кремния, пассивированных водородом, и нанокристаллах, помещённых в матрицу  $\text{SiO}_2$ . Показано, что электронные и дырочные состояния в пассивированных нанокристаллах кремния локализованы внутри кристалла, оптические переходы преимущественно осуществляются в диапазоне длин волн 440–620 нм при диаметре кристалла 4 нм. Окружение матрицей  $\text{SiO}_2$  приводит к увеличению вероятности оптических переходов и появлению плотности состояний вне нанокристалла, излучение в этом случае происходит в диапазоне волн 410–620 нм при диаметре кристалла 4 нм. **Практическая значимость.** Перспектива применения нанокристаллов кремния в фотонике и фотовольтаике, разработка технологии создания нанокристаллов кремния с заданными оптическими свойствами.

**Ключевые слова:** нанокристаллы кремния, метод сильной связи, пассивация поверхности

**Благодарность:** авторы выражают благодарность М.О. Нестоклону за вклад в разработку используемого в работе метода. И.Д. Авдеев выражает благодарность Фонду развития теоретической физики и математики «БАЗИС» за оказанную поддержку.

**Ссылка для цитирования:** Герт А.В., Белолипецкий А.В., Авдеев И.Д. Плотность электронных состояний в нанокристаллах кремния в матрице  $\text{SiO}_2$  и с пассивированной водородом поверхностью // Оптический журнал. 2024. Т. 91. № 6. С. 39–46. <http://doi.org/10.17586/1023-5086-2024-91-06-39-46>

Коды OCIS: 250.5590 160.4236.

# The density of electronic states in silicon nanocrystals in a SiO<sub>2</sub> matrix and with a hydrogen passivated surface

ANTON V. GERT<sup>1</sup>✉, ALEXEY V. BELOLIPETSKY<sup>2</sup>, IVAN D. AVDEEV<sup>3</sup>

*Ioffe Institute, Saint-Petersburg, Russia*

<sup>1</sup>anton.gert@mail.ioffe.ru

<https://orcid.org/0009-0009-2531-6662>

<sup>2</sup>alexey.belolipetskiy@mail.ioffe.ru

<https://orcid.org/0000-0003-1287-7793>

<sup>3</sup>ivan.avdeev@mail.ioffe.ru

<https://orcid.org/0000-0001-6941-3880>

## Abstract

**Subject of study.** The work dedicates to optical transitions and absorption cross-section calculation in the silicon nanocrystals in a SiO<sub>2</sub> dielectric matrix and nanocrystals passivated with hydrogen. **Purpose of study.** Calculate the probability of optical transitions and the density of electronic states in silicon nanocrystals with different environments, adapt the tight-binding method for correct passivation of dangling silicon bonds. **Method.** The work uses a variant of the tight binding method taking into account a large number of s, p, d and s\* orbitals. **Main results.** The local density of states of electrons and holes, the probabilities of optical transitions, and the absorption cross section in silicon nanocrystals passivated with hydrogen and nanocrystals placed in a SiO<sub>2</sub> matrix are calculated. It has been shown that electronic and hole states in passivated silicon nanocrystals are localized inside the crystal; optical transitions occur with a wavelength in the range of 440–620 nm. Surrounding the SiO<sub>2</sub> matrix leads to an increase of the probability of optical transitions and the appearance of density of states outside the nanocrystal; radiation in this case occurs in the wavelength range 410–620 nm. **Practical significance.** Prospects for the use of silicon nanocrystals in photonics and photovoltaics, development of technology for creating silicon nanocrystals with specified optical properties.

**Keywords:** silicon nanocrystals, tight-binding method, surface passivation

**Acknowledgment:** the authors express gratitude to M.O. Nestoklon for his contribution to the development of the method used in the work. I.D. Avdeev expresses gratitude to the Foundation for the Development of Theoretical Physics and Mathematics "BASIS" for the support provided.

**For citation:** Gert A.V., Belolipetskiy A.V., Avdeev I.D. The density of electronic states in silicon nanocrystals in a SiO<sub>2</sub> matrix and with a hydrogen passivated surface [in Russian] // *Opticheskii Zhurnal*. 2024. V. 91. № 6. P. 39–46. <http://doi.org/10.17586/1023-5086-2024-91-06-39-46>

**OCIS codes:** 250.5590 160.4236.

## ВВЕДЕНИЕ

Кремний в настоящее время является основным материалом микроэлектроники. При этом, его применение в оптоэлектронике ограничено его непрямозонной структурой, которая практически исключает возможность излучать оптическое излучение и снижает эффективность оптического поглощения. В нанокристаллах кремния диаметром 2–7 нм это ограничение частично снимается: электроны и дырки локализованы и, как следствие, не имеют фиксированного квазиимпульса в соответствии с принципом неопределённости Гейзенберга. Поэтому оптические переходы в нанокристаллах кремния разрешены, но являются квази-

прямыми. Этот факт стимулировал бурное развитие экспериментальных и теоретических исследований оптических явлений в кремниевых, германиевых и кремний-германиевых нанокристаллах с целью создания структур с оптимальными свойствами для оптоэлектроники [1, 2].

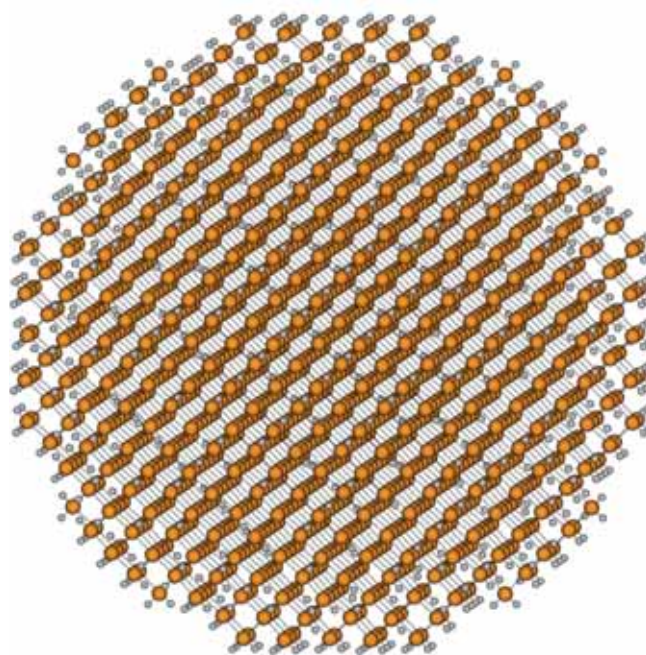
Целью данной работы является теоретическое исследование вероятности оптических переходов, сечения поглощения и плотности электронных состояний в нанокристаллах кремния с различным окружением, адаптация метода сильной связи для корректного описания пассивации оборванных связей кремния.

## МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

В современном виде метод сильной связи был представлен в основополагающей статье Слэтера и Костера в 1954 г. [3]. Его формализм основан на одночастичном приближении уравнения Шредингера и существовании набора ортонормированных орбиталей Лёвдина [4], локализованных в окрестности узлов кристаллической решётки. В эмпирическом варианте метода явный вид орбиталей неизвестен, а матричные элементы гамильтониана на базисных функциях полагаются свободными параметрами. Эти параметры подбираются эмпирически исходя из особенностей зонной структуры моделируемого материала, определяемых экспериментально или с помощью точных расчётов из первых принципов [5]. Количество матричных элементов зависит от учитываемого в модели числа орбиталей на атоме и от того, на каком расстоянии обрезается взаимодействие между ними. В нашей работе используется приближение ближайших соседей, в котором учитываются перекрытия только на соседних атомах и которое хорошо зарекомендовало себя для описания широкого класса полупроводниковых соединений [6]. Подробно использованный в данной работе метод описан в [7].

Хотя метод известен с 1954 г., реализован он был только в середине 70-х годов Чади и Коэном [8]. Трудность практической реализации связана с вычислительной сложностью обратной задачи: расчёт зонной структуры по известным параметрам намного проще, чем нахождение параметризации по известной зонной структуре. Как показали Жанку с соавторами [9], модель, учитывающая  $s$ ,  $p$ ,  $d$ ,  $s^*$  орбитали и взаимодействие только между ближайшими соседями является «численно полной» в большом диапазоне энергий (приблизительно 15 эВ). Этого достаточно для практически идеального воспроизведения зонной структуры во всей зоне Бриллюэна, включая две первые зоны проводимости. В настоящей работе данный метод использован для моделирования кремниевых нанокристаллов, их диэлектрического окружения и пассивирующих атомов водорода.

Насыщение оборванных связей атомами водорода (рис. 1) является традиционным подходом при расчётах кремниевых нанокристаллов в полуэмпирических методах. Такая пассивация экспериментально реализована на коллоидных кремниевых нанокристаллах [10, 11].

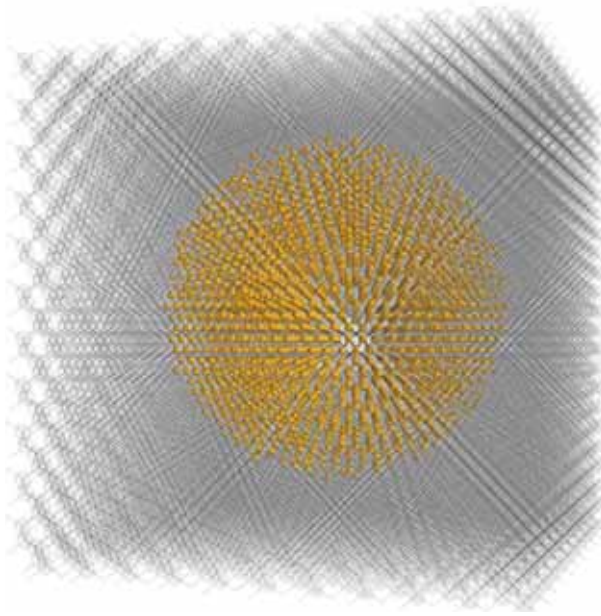


**Рис. 1.** Кремниевый нанокристалл диаметром 4 нм с пассивированной водородом поверхностью. Атомы Si показаны большими (оранжевыми) сферами, атомы H — малыми серыми сферами

**Fig. 1.** A silicon single crystal with a diameter of 4 nm with a hydrogen passivated surface. Si atoms are shown by large (orange online) spheres, H atoms are shown by small grey ones

В данной работе в расчётах были учтены все  $\sigma$ -связи между  $s$ -орбиталью водорода и  $s$ -,  $p$ -,  $d$ -,  $s^*$ -орбиталями нанокристалла кремния, что позволило полностью исключить появление поверхностных состояний в численном расчёте.

Нанокристаллы кремния, встроенные в диэлектрическую матрицу  $\text{SiO}_2$ , также являются популярными и перспективными объектами исследования. В расчётах методом сильной связи матрица  $\text{SiO}_2$  может быть представлена как бесконечный виртуальный кристалл с решёткой типа алмаза и зонной структурой аналогичной  $\beta$ -кристогалиту. Это позволяет избежать усреднения по различным атомным конфигурациям и обеспечивает разумное согласие с экспериментом [12]. Система нанокристалл-матрица моделировалась в виде кубической сверхъячейки из атомов виртуального кристалла  $\text{SiO}_2$  и сферической области, внутри которой атомы кислорода заменяются на атомы Si (рис. 2). Чтобы избежать возникновения поверхностных состояний на краях



**Рис. 2.** Кремниевый нанокристалл диаметром 4 нм, встроенный в матрицу  $\text{SiO}_2$ . Матрица  $\text{SiO}_2$  представлена в виде идеального виртуального кристалла с решёткой типа цинковой обманки и постоянной решётки Si. Оборванные химические связи на поверхности компенсируются периодическими граничными условиями Борна–Кармана

**Fig. 2.** Silicon nanocrystal 4 nm in diameter embedded in  $\text{SiO}_2$  matrix. The  $\text{SiO}_2$  matrix is represented as ideal virtual crystal with zinc blende structure and Si lattice constant. The dangling chemical bonds on the surface are compensated by the periodic Born–Karman boundary conditions

сверхъячейки, вводятся граничные условия Борна–Кармана. Дисперсия сверхъячейки не учитывается.

Несмотря на то, что матрица  $\text{SiO}_2$  — аморфная, для того чтобы моделировать её как идеальный виртуальный кристалл, используется ряд приближений: 1) в системе, в том числе на границе нанокристалла, нет напряжений; 2) на расстоянии 5–10 монослоёв от нанокристалла матрица  $\text{SiO}_2$  находится в своей единственной кубической фазе  $\beta$ -кristобалита.

Впервые идея моделирования  $\text{SiO}_2$  вблизи кремниевых нанокристаллов таким способом была предложена в [13], в которой также были оптимизированы параметры сильной связи для виртуального  $\beta$ -кristобалита для наилучшего согласия его зонной структуры с точными расчётами из первых принципов [14]. Энергетический сдвиг зонной структуры

$\text{SiO}_2$  относительно Si был установлен путём сопоставления рассчитанных оптических спектров кремниевых нанокристаллов с экспериментом [12].

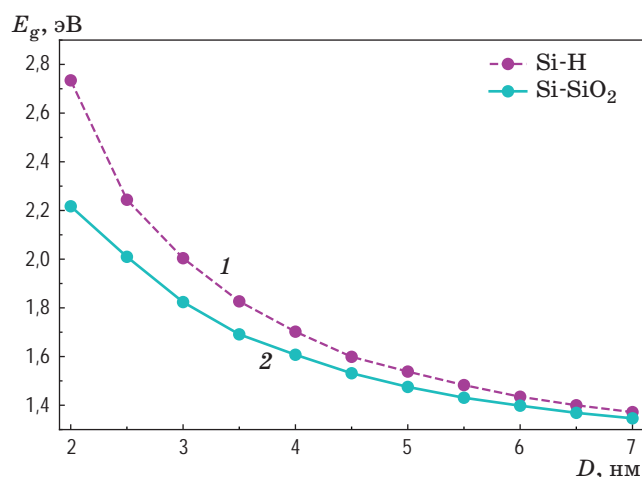
## РЕЗУЛЬТАТЫ

В этом разделе приведены результаты численных расчётов для сферических нанокристаллов кремния диаметром 2–7 нм (рис. 1, 2). Параметризация атомов водорода на поверхности нанокристалла была адаптирована для корректной пассивации оборванных связей кремния в  $sp^3d^5s^*$ -варианте метода сильной связи, что позволило избежать возникновения поверхностных состояний. Для химической связи Si–H были выбраны следующие модельные параметры: энергия s-орбитали атома водорода равна  $-3,2$  эВ, параметры перекрытия типа  $\sigma$  выбраны в виде удвоенных аналогичных параметров для связи Si–Si, приведённых в обзоре [7]. Такая модель полностью исключает возникновение поверхностных состояний. Влияние деформации кристаллической решётки нанокристаллов кремния на плотность электронных состояний рассматривалось в [7]. В данной работе этот эффект не учитывался.

Зависимость ширины запрещённой зоны нанокристаллов кремния от их диаметра, пассивированных водородом и в матрице  $\text{SiO}_2$  приведена на рис. 3. С увеличением размера нанокристаллов ширина запрещённой зоны в обоих случаях стремится к значению, соответствующему объёмному кремнию (1,12 эВ).

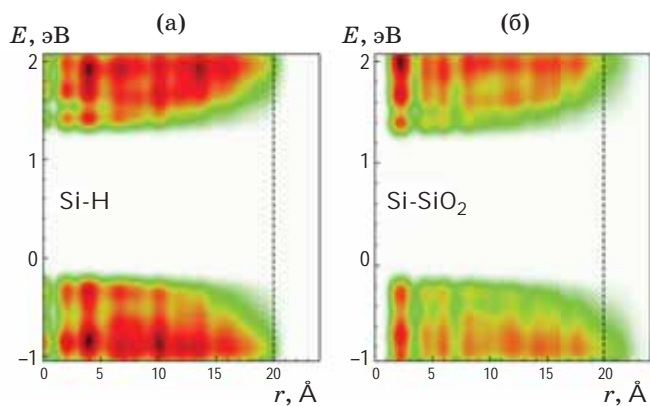
На рис. 4 показана локальная плотность электронных и дырочных состояний в нанокристаллах кремния как функция расстояния от центра нанокристалла и энергии этих состояний. Видно, что в нанокристаллах кремния, пассивированных водородом, по сравнению с нанокристаллами в матрице  $\text{SiO}_2$  состояния локализованы ближе к центру нанокристалла, что обусловлено отсутствием проникновения волновой функции в матрицу.

Результаты расчёта локальной плотности электронных состояний в обратном пространстве для нанокристаллов с различным окружением приведены на рис. 5, где по горизонтальной оси отложено расстояние в зоне Бриллюэна на пути от L - к  $\Gamma$ - и далее к X-долинам, а по вертикальной оси — энергия электронных состояний. Видно, что разница в диэлек-



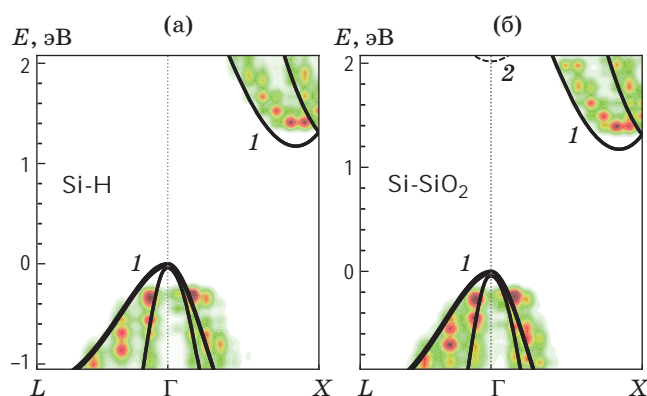
**Рис. 3.** Вероятности межзонных оптических переходов в кремниевых нанокристаллах диаметром 4 нм в зависимости от энергии фотона. Вероятности переходов в нанокристаллах, покрытых водородом, показаны кривой 1, в нанокристаллах, встроенных в матрицу SiO<sub>2</sub> — кривой 2

**Fig. 3.** Probabilities of interband optical transitions in 4 nm silicon nanocrystals as a function of photon energy. Probabilities of transitions in nanocrystals passivated by hydrogen shown by curve 1 and in nanocrystals embedded in the SiO<sub>2</sub> matrix by curve 2



**Рис. 4.** Распределение по энергии усреднённой радиальной локальной плотности состояний в реальном пространстве 4 нм кремниевого нанокристалла пассивированного водородом (а) и встроенного в диэлектрическую матрицу SiO<sub>2</sub> (б). Амплитуда плотности состояний показана цветом. Вертикальные прерывистые линии указывают на границы нанокристаллов

**Fig. 4.** Energy distribution of average radial local density of states in real space of 4 nm silicon nanocrystal passivated by hydrogen (a) and embedded in SiO<sub>2</sub> matrix (б). Amplitude of the density of states is shown by color. Vertical dashed lines indicate the boundaries of the nanocrystals



**Рис. 5.** Распределение по энергии локальной плотности состояний в обратном пространстве на  $\Gamma$ -X-L пути в зоне Бриллюэна для 4 нм кремниевого нанокристалла, пассивированного водородом (а) и встроенного в диэлектрическую матрицу SiO<sub>2</sub> (б). Амплитуда плотности состояний показана цветом. Кривой 1 показана дисперсия объёмного Si. Кривой 2 показан небольшой участок дисперсии матрицы SiO<sub>2</sub> вблизи  $\Gamma$  точки

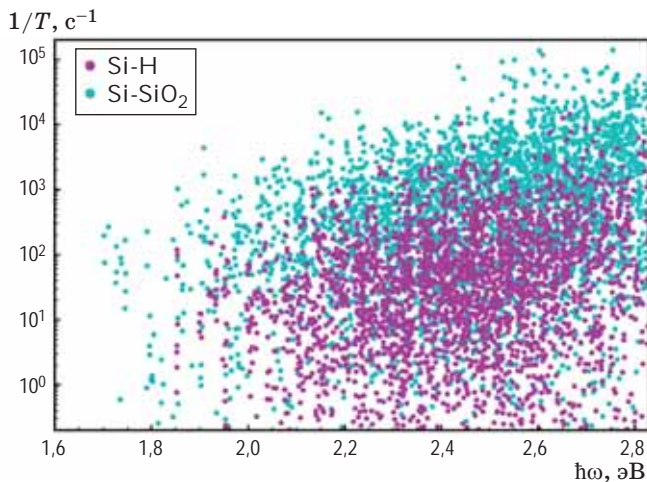
**Fig. 5.** Energy distribution of local density of states in reciprocal space in  $\Gamma$ -X-L path in the Brillouin zone of 4 nm silicon nanocrystal passivated by hydrogen (a) and embedded in SiO<sub>2</sub> matrix (б). Amplitude of the density of states is shown by color. Curve 1 shows dispersion of bulk Si. Curve 2 shows a small fraction of SiO<sub>2</sub> dispersion near the  $\Gamma$  point

трическом окружении нанокристаллов не оказывает существенного влияния на электронные и дырочные состояния в обратном пространстве. В обоих случаях непрямозонность кремния компенсируется пространственным ограничением электрона в нанокристалле, что делает возможным квазипрямые излучательные переходы [16, 17].

Для обоих типов окружения нанокристаллов кремния в зависимости от энергии фотона было рассчитано сечение поглощения за счёт прямых межзонных оптических переходов и вероятности излучательной рекомбинации. Вероятность спонтанной излучательной рекомбинации электронов в возбуждённых состояниях с дырками в основном состоянии  $h$  в нанокристалле [5] рассчитывается по формуле:

$$\frac{1}{\tau_r} = \frac{4\epsilon_0 F^2 \langle h|r|e \rangle n_{out}(\hbar\omega)^3}{3\hbar c^3}, \quad (1)$$

где  $\hbar\omega$  — энергия фотона,  $\tau_r$  — время излучательной рекомбинации,  $F = 3n_{out}^2 / (n_{in}^2 + 2n_{out}^2)$  — локальный фактор поля,  $n_{in}$  и



**Рис. 6.** Вероятности межзонных оптических переходов в кремниевых нанокристаллах диаметром 4 нм в зависимости от энергии фотона. Вероятности переходов в нанокристаллах, покрытых водородом, показаны темными серыми точками (пурпурными онлайн) в нанокристаллах, встроенных в матрицу  $\text{SiO}_2$  — светло-серыми (голубыми онлайн)

**Fig. 6.** Probabilities of interband optical transitions in 4 nm silicon nanocrystals as a function of photon energy. Probabilities of transitions in nanocrystals passivated by hydrogen shown by dark gray dots (magenta online) and in nanocrystals embedded in the  $\text{SiO}_2$  matrix by light gray (cyan online)

$n_{\text{out}}$  — показатели преломления среды внутри и снаружи нанокристалла, соответственно. Для пассивированных нанокристаллов в качестве  $n_{\text{out}}$  использовался показатель преломления воды, для нанокристаллов в матрице — показатель  $\text{SiO}_2$ .

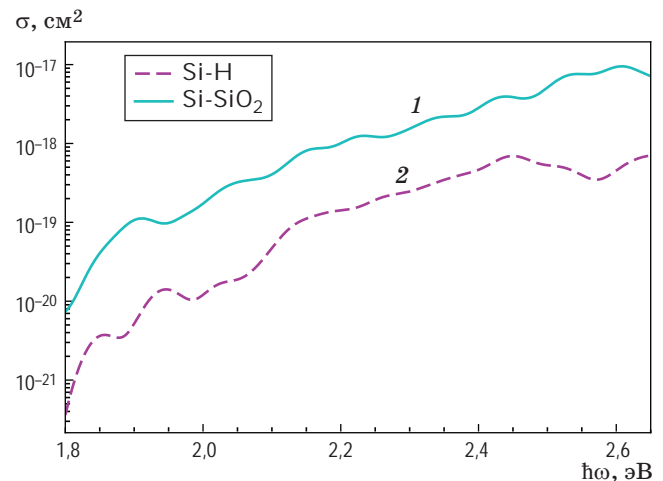
Результаты расчётов приведены на рис. 6 и 7. За счёт влияния матрицы сечение поглощения в нанокристаллах кремния в  $\text{SiO}_2$  больше сечения для нанокристаллов, пассивированных водородом во всём диапазоне энергий (рис. 6).

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе методом сильной связи с большим количеством орбиталей были рассчитаны плотности электронных и дырочных состояний

## СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Priolo F., Gregorkiewicz T., Galli M., Krauss T.F. Silicon nanostructures for photonics and photovoltaics // Nature Nanotechnol. 2014. V. 9. № 1. P. 19–32. <https://doi.org/10.1038/nnano.2013.271>



**Рис. 7.** Сечения поглощения за счёт прямых межзонных оптических переходов в кремниевых нанокристаллах диаметром 4 нм в зависимости от энергии фотона. Кривая 1 показывает вероятности переходов в кремниевых нанокристаллах, встроенных в матрицу  $\text{SiO}_2$ , кривая 2 — в нанокристаллах, покрытых водородом

**Fig. 7.** Absorption cross sections due to direct interband optical transitions in 4 nm silicon nanocrystals as a function of photon energy. Curve 1 shows the probabilities in Si nanocrystal embedded in  $\text{SiO}_2$ , curve 2 — in H-passivated Si nanocrystal

и вероятности оптических переходов в нанокристаллах кремния, покрытых водородом, и в нанокристаллах, встроенных в матрицу  $\text{SiO}_2$ . Была адаптирована схема параметризации химической связи Si-H, которая использовалась для моделирования нанокристаллов, пассивированных водородом.

Показано, что за счёт возможности перехода электронов в диэлектрическую матрицу у кремниевых нанокристаллов в  $\text{SiO}_2$  ширина запрещённой зоны меньше, чем у нанокристаллов, пассивированных водородом. Также для обоих типов нанокристаллов рассчитаны вероятности излучательной рекомбинации экситонов и сечения поглощения.

Результаты работы могут быть полезны как для развития технологии создания кремниевых наноструктур, так и для улучшения теоретических методов исследования.

## REFERENCES

1. Priolo F., Gregorkiewicz T., Galli M., Krauss T.F. Silicon nanostructures for photonics and photovoltaics // Nature Nanotechnol. 2014. V. 9. № 1. P. 19–32. <https://doi.org/10.1038/nnano.2013.271>

2. Boyraz O., Jalali B. Demonstration of a silicon Raman laser // *Opt. Express*. 2004. V. 12. № 21. P. 5269. <https://doi.org/10.1364/OPEX.12.005269>
3. Slater J.C., Koster G.F. Simplified LCAO method for the periodic potential problem // *Phys. Rev.* 1954. V. 94. № 6. P. 1498. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.94.1498>
4. Löwdin P.-O. On the non-orthogonality problem connected with the use of atomic wave functions in the theory of molecules and crystals // *J. Chem. Phys.* 1950. V. 18. № 3. P. 365–375. <https://doi.org/10.1063/1.1747632>
5. Pathak S., Rakib T., Hou R., Nevidomskyy A., Ertekin E., Johnson H.T., Wagner L.K. Accurate tight-binding model for twisted bilayer graphene describes topological flat bands without geometric relaxation // *Phys. Rev. B*. 2022. V. 105. P. 115141
6. Vogl P., Hjalmarson H.P., Dow J.D. A semi-empirical tight-binding theory of the electronic structure of semiconductors // *J. Phys. Chem. Sol.* 1983. V. 44. № 365. [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(83\)90064-1](https://doi.org/10.1016/0022-3697(83)90064-1)
7. Герт А.В., Нестоклон М.О., Прокофьев А.А., Ясевич И.Н. Моделирование методом сильной связи кремниевых и германиевых нанокристаллов. Обзор // *ФТП*. 2017. Т. 51. В. 10. С. 1325–1340. <https://doi.org/10.21883/FTP.2017.10.45009.8605>
8. Chadi D.J., Cohen M.L. Tight-binding calculations of the valence bands of diamond and zincblende crystals // *Physica status solidi (b)*. 1975. V. 68 P. 405. <https://doi.org/10.1002/pssb.2220680140>
9. Jancu J.-M., Scholz R., Beltram F., Bassani F. Empirical sp<sup>3</sup>\* tight-binding calculation for cubic semiconductors: General method and material parameters // *Phys. Rev. B*. 1998. V. 57. № 11. P. 6493. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.57.6493>
10. Delerue C., Lanoo M. Nanostructures. Theory and modelling. Berlin: Springer, 2004. 245 p.
11. Гусев О.Б., Поддубный А.Н., Прокофьев А.А., Ясевич И.Н. Излучение кремниевых нанокристаллов. Обзор // *ФТП*. 2013. Т. 47 № 2. С. 147.
12. Nestoklon M.O., Avdeev I.D., Belolipetskiy A.V., Sychugov I., Pevere F., Linnros J., Yassievich I.N. Tight-binding calculations of the optical properties of Si nanocrystals in a SiO<sub>2</sub> matrix // *Faraday Discuss.* 2020. V. 222. P. 258–273. <https://doi.org/10.1039/C9FD00090A>
13. Белолипецкий А.В., Нестоклон М.О., Ясевич И.Н. Моделирование уровней размерного квантования Si-нанокристаллов в матрице SiO<sub>2</sub>: подбор параметров эмпирического метода сильной связи // *ФТП*. 2018. Т. 52. В. 10. С. 1145. <https://doi.org/10.21883/FTP.2018.10.46454.8859>
14. Seino K., Bechstedt F., Kroll P. Band alignment at a nonplanar Si/SiO<sub>2</sub> interface // *Phys. Rev. B*. 2010. V. 82. P. 085320. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.085320>
15. Poddubny A.N., Dohnalová K. Direct band gap silicon quantum dots achieved via electronegative capping // *Phys. Rev. B*. 2014. V. 90. P. 245439. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.245439>
16. Avdeev I.D., Belolipetskiy A.V., Ha N.N., Nestoklon M.O., Yassievich I.N. Absorption of Si, Ge, and SiGe alloy nanocrystals embedded in SiO<sub>2</sub> matrix // *Journal of Applied Physics*. 2020. V. 127. P. 114301. <https://doi.org/10.1063/1.5139960>
2. Boyraz O., Jalali B. Demonstration of a silicon Raman laser // *Opt. Express*. 2004. V. 12. № 21. P. 5269. <https://doi.org/10.1364/OPEX.12.005269>
3. Slater J.C., Koster G.F. Simplified LCAO method for the periodic potential problem // *Phys. Rev.* 1954. V. 94. № 6. P. 1498. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.94.1498>
4. Löwdin P.-O. On the non-orthogonality problem connected with the use of atomic wave functions in the theory of molecules and crystals // *J. Chem. Phys.* 1950. V. 18. № 3. P. 365–375. <https://doi.org/10.1063/1.1747632>
5. Pathak S., Rakib T., Hou R., Nevidomskyy A., Ertekin E., Johnson H.T., Wagner L.K. Accurate tight-binding model for twisted bilayer graphene describes topological flat bands without geometric relaxation // *Phys. Rev. B*. 2022. V. 105. P. 115141
6. Vogl P., Hjalmarson H.P., Dow J.D. A semi-empirical tight-binding theory of the electronic structure of semiconductors // *J. Phys. Chem. Sol.* 1983. V. 44. № 365. [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(83\)90064-1](https://doi.org/10.1016/0022-3697(83)90064-1)
7. Gert A.V., Nestoklon M.O., Prokofiev A.A., Yassievich I.N. Light emission of silicon nanocrystals (a review) // *Semiconductors*. 2017. V. 51. № 10. P. 1274–1289. <https://doi.org/10.21883/FTP.2017.10.45009.8605>
8. Chadi D.J., Cohen M.L. Tight-binding calculations of the valence bands of diamond and zincblende crystals // *Physica status solidi (b)*. 1975. V. 68 P. 405. <https://doi.org/10.1002/pssb.2220680140>
9. Jancu J.-M., Scholz R., Beltram F., Bassani F. Empirical sp<sup>3</sup>\* tight-binding calculation for cubic semiconductors: General method and material parameters // *Phys. Rev. B*. 1998. V. 57. № 11. P. 6493. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.57.6493>
10. Delerue C., Lanoo M. Nanostructures. Theory and modelling. Berlin: Springer, 2004. 245 p.
11. Gusev O.B., Poddubny A.N., Prokofiev A.A., Yassievich I.N. Light emission of silicon nanocrystals (a review) // *Semiconductors*. 2013. V. 47. P. 147–167.
12. Nestoklon M.O., Avdeev I.D., Belolipetskiy A.V., Sychugov I., Pevere F., Linnros J., Yassievich I.N. Tight-binding calculations of the optical properties of Si nanocrystals in a SiO<sub>2</sub> matrix // *Faraday Discuss.* 2020. V. 222. P. 258–273. <https://doi.org/10.1039/C9FD00090A>
13. Belolipetskiy A.V., Nestoklon M.O., Yassievich I.N., Simulation of electron and hole states in Si nanocrystals in a SiO<sub>2</sub> matrix: Choice of parameters of the empirical tight-binding method // *Semiconductors*. 2018. V. 52. P. 1264.
14. Seino K., Bechstedt F., Kroll P. Band alignment at a nonplanar Si/SiO<sub>2</sub> interface // *Phys. Rev. B*. 2010. V. 82. P. 085320. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.085320>
15. Poddubny A.N., Dohnalová K. Direct band gap silicon quantum dots achieved via electronegative capping // *Phys. Rev. B*. 2014. V. 90. P. 245439. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.245439>
16. Avdeev I.D., Belolipetskiy A.V., Ha N.N., Nestoklon M.O., Yassievich I.N. Absorption of Si, Ge, and SiGe alloy nanocrystals embedded in SiO<sub>2</sub> matrix // *Journal of Applied Physics*. 2020. V. 127. P. 114301. <https://doi.org/10.1063/1.5139960>

**АВТОРЫ**

**Антон Владимирович Герт** — канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник, Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, 194021, Санкт-Петербург, Россия; Scopus ID: 55631806500, <https://orcid.org/0009-0009-2531-6662>, [anton.gert@mail.ioffe.ru](mailto:anton.gert@mail.ioffe.ru)

**Иван Дмитриевич Авдеев** — канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник, Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, 194021, Санкт-Петербург, Россия; Scopus ID: 57192655599, <https://orcid.org/0000-0001-6941-3880>, [ivan.avdeev@mail.ioffe.ru](mailto:ivan.avdeev@mail.ioffe.ru)

**Алексей Владимирович Белолипецкий** — канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник, Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, 194021, Санкт-Петербург, Россия; Scopus ID: 57191377767, <https://orcid.org/0000-0003-1287-7793>, [a\\_belolipetskiy@mail.ru](mailto:a_belolipetskiy@mail.ru)

*Статья поступила в редакцию 01.10.2023  
Одобрена после рецензирования 12.02.2024  
Принята к печати 29.04.2024*

**AUTHORS**

**Anton V. Gert** — PhD in Physics and Mathematics, Scientific Researcher, Ioffe Institute, 194021, Saint-Petersburg; Russia; Scopus ID: 55631806500, <https://orcid.org/0009-0009-2531-6662>, [anton.gert@mail.ioffe.ru](mailto:anton.gert@mail.ioffe.ru)

**Ivan D. Avdeev** — PhD in Physics and Mathematics, Scientific Researcher, Ioffe Institute, 194021, Saint-Petersburg; Russia; Scopus ID: 57192655599, <https://orcid.org/0000-0001-6941-3880>, [ivan.avdeev@mail.ioffe.ru](mailto:ivan.avdeev@mail.ioffe.ru)

**Alexey V. Belolipetskii** — PhD in Physics and Mathematics, Scientific Researcher, Ioffe Institute, 194021, Saint-Petersburg; Russia; Scopus ID: 57191377767, <https://orcid.org/0000-0003-1287-7793>, [a\\_belolipetskiy@mail.ru](mailto:a_belolipetskiy@mail.ru)

*The article was submitted to the editorial office 01.10.2023  
Approved after review 12.02.2024  
Accepted for publication 29.04.2024*