

КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ДИСЛОКАЦИИ ЛОМЕРА В КРЕМНИИ

Ю. К. Тимошенко

Воронежский государственный университет

Поступила в редакцию 12.11.2009 г.

Аннотация. Выполнены квантовохимические расчеты электронной структуры дислокации Ломера в кластерном приближении. Обсуждается локализация электронных состояний в области ядра дислокации

Ключевые слова: дислокация Ломера, электронная структура, кластерное приближение

Annotation. Quantum chemical calculations of electronic structure of Lomer dislocation are executed in cluster approach. Localization of electronic states in the region of a dislocation core is discussed.

Keywords: Lomer dislocation, electronic structure, cluster approach.

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время стал заметен интерес к исследованию кремния, содержащего примесные атомы металлов в области ядра краевой дислокации [1]. Хотя экспериментальных работ в этой области выполнено довольно много, теоретически данная проблематика изучена явно недостаточно. В частности, это относится к теории электронной структуры таких систем. Более того, это можно сказать и о краевых дислокациях в кремнии без каких-либо примесных атомов. В настоящем кратком сообщении приводятся результаты расчетов одноэлектронных состояний дислокации Ломера в кремнии [2] в кластерном приближении. Решение этой задачи является необходимым этапом для перехода к теоретическому изучению электронной структуры примесных атомов в области ядра дислокации.

2. ТЕОРИЯ

Использовалась модель молекулярного кластера [3]. Для определения координат атомов в нулевом приближении использовалась демо-версия известной программы ADESH. Оборванные связи на поверхности кластера пассивировались атомами водорода. Кластер содержал 540 атомов кремния и 270 атомов водорода. Атомы кремния, имеющие связи с водородом, и сами водородные атомы «замо-

раживались», а координаты внутренних атомов кремния находились методом молекулярной динамики в режиме квазидинамического демпфирования, который применялся нами ранее при рассмотрении краевых дислокаций в полярных соединениях [4]. Взаимодействия атомов типа Si-Si и Si-H рассматривались в рамках полуэмпирических моделей [5, 6]. После определения координат кластера проводился квантовохимический расчет электронных состояний $\text{Si}_{540}\text{H}_{270}$ в приближении Хартри—Фока—Слейтера [7] с использованием псевдопотенциала [8]. Вычисления проводились по программе [9].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ОБСУЖДЕНИЕ

Рассчитанная равновесная пространственная конфигурация кластера представлена на рис. 1. Для атомов в области ядра дислокации рассчитывались локальные парциальные плотности состояний (ЛПЭС) по формулам

$$\rho_{l\alpha}(\varepsilon) = \sum_i W_{l\alpha,i} \delta(\varepsilon - E_i), \quad (1)$$

$$W_{l\alpha,i} = \sum_{l',\beta} C_{l\alpha,i} S(l\alpha, l'\beta) C_{l'\beta,i}, \quad (2)$$

где $C_{l\alpha,i}$ — орбитальный коэффициент в разложении молекулярной орбитали по атомным орбиталям (АО) $\varphi_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$, соответствующий одночастичной энергии E_i ; l — номер атома, α — тип АО, i — номер состояния, S — матрица интегралов перекрывания АО.

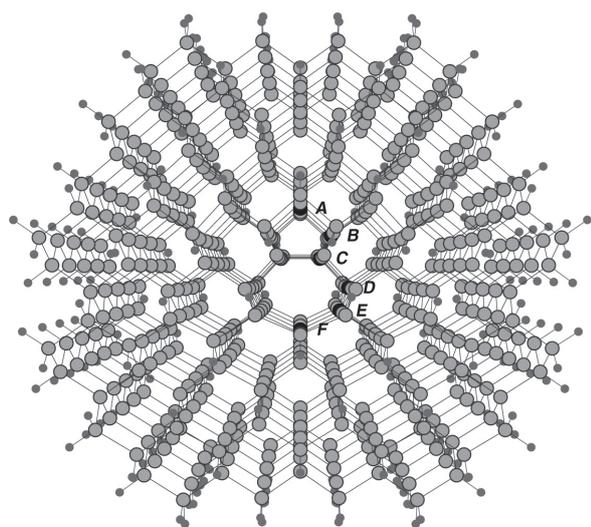


Рис. 1. Кластер $\text{Si}_{540}\text{H}_{270}$, моделирующий дислокацию Ломера в кремнии

На рис. 2 представлены ЛППС для 3р АО атомов кремния, обозначенных на рис. 1 буквами А, В, С, D, Е и F. Стрелкой на рис. 2 (F) отмечено положение самого нижнего незаполненного уровня (СННУ). По понятным причинам кластерные расчеты не способны дать информацию об отщеплениях локальных уровней от краев зон. Однако, по виду ЛППС можно сделать выводы о наличии локализованных состояний и степени их локализации. Так, из рис. 2 следует, что заполненные состояния вблизи дна кластерной щели, более локализованы (см. 1 (А) и 1 (В)), чем незаполненные вблизи СННУ. Наличие этих локализованных состояний, несомненно, должно быть учтено при рассмотрении в дальнейшем квантовых переходов в таких системах. Информация о пространственной равновесной конфигурации

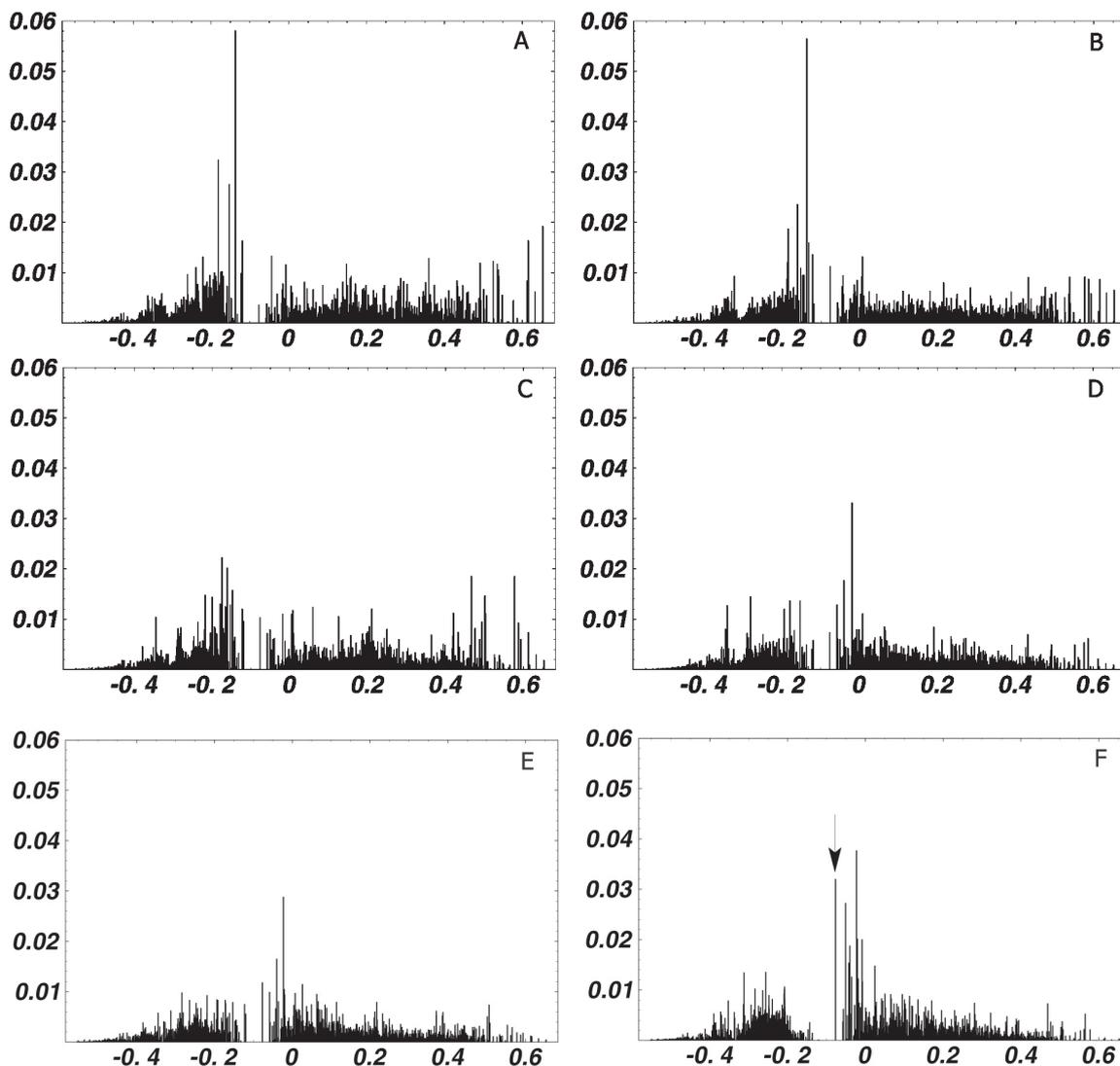


Рис. 2. Весовые множители $W_{\alpha,i}$ в ЛППС для 3р АО атомов Si в области ядра дислокации (произв. ед.); по горизонтальным осям отложены энергии в атомных единицах Хартри

кластера может быть использована для проведения расчетов электронной структуры в модели квантовой нити, как это было сделано нами ранее для хлоридов серебра и калия [4].

БЛАГОДАРНОСТИ

Выражаю признательность зав. кафедрой цифровых технологий ФКН ВГУ С. Д. Кургалину за возможность выполнения расчетов на компьютерном кластере по программе Gaussian [9].

ЛИТЕРАТУРА

1. *Vo O.* Electrical properties of gold in dislocated silicon / O. Vo, V. V. Kveder, M. Seibt // Phys. Status Sol.(a) — 2007. Vol. 204, No.7, P. 2185—2189.
2. *Осипьян Ю. А.* Электронные свойства дислокаций в полупроводниках / Осипьян Ю. А., Бредихин С. И., Кведер В. В. и др. — М.: Эдиториал УРРС, 2000. — 320 с.
3. *Эварестов Р. А.* Квантовохимические методы в теории твердого тела / Р. А. Эварестов — Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1982. — 280 с.

Тимошенко Юрий Константинович
— к.ф.-м.н., доцент кафедры оптики и спектроскопии ВГУ
Тел.: (4732) 208-780
E-mail: yutim@phys.vsu.ru

4. *Timoshenko Yu. K.* Electronic structure of the KCl and AgCl nanocrystals with the edge dislocations / Yu. K. Timoshenko, V. A. Shunina // Phys. Stat. Sol. (c) — 2005. — Vol. 2, № 6. — P. 1788—1791.

5. *Tersoff J.* Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties / J. Tersoff — Phys. Rev. B — 1988. — Vol. 38, № 14 — P. 9902—9905.

6. *Kwon I.* Molecular-dynamics simulations of defect formation in hydrogenated amorphous silicon / I. Kwon, R. Biswas, C. M. Soukoulis // Phys. Rev. B — 1992. — Vol. 45, № 7 — P. 3332—3339.

7. *Слэтер Дж.* Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел / Дж. Слэтер — М.: Мир, 1978. — 658 с.

8. *Hay P. J.* Ab initio effective core potentials for molecular calculations / P. J. Hay, W. R. Wadt // J. Chem. Phys. — 1985. — Vol. 82, № 1 — P. 270—310.

9. *Frisch M. J.* Gaussian 03, Revision C.02 / M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, et al. — Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004.

Timoshenko Yury K. — Ph. D. in Physics, Associated Professor of the Chair of Optics and Spectroscopy of the Voronezh State University
Тел.: (4732) 208-780
E-mail: yutim@phys.vsu.ru