

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

ВАКАНСИЯ В НАНОКРЕМНИИ

Мухтаров Адил Позилович

канд. физ.-мат. наук, доцент, Алмалыкский филиал НИТУ МИСиС,
Узбекистан, г. Ташкент
E-mail: amukhtarov@gmail.com

Нормуродов Асрор Базарович

канд. физ.-мат. наук, ст. научный сотрудник, Институт ядерной физики,
Узбекистан, г. Ташкент

Усманова Сайёра Адилевна

PhD докторант, Национальный университет Узбекистана,
Узбекистан, г. Ташкент

VACANCY IN NANOSILICON

Adil Mukhtarov

candidate of Science, Senior Lecturer, Almalyk Branch of NUST MISiS
Uzbekistan, Tashkent

Asror Normurodov

candidate of Science, Senior Researcher, Institute of Nuclear Physics
Uzbekistan, Tashkent

Sayyora Usmanova

PhD student, National University of Uzbekistan,
Uzbekistan, Tashkent

АННОТАЦИЯ

Стабильность и положение глубоких локальных уровней различных заряженных вакансий в наноразмерном кластере кремния, состоящем из 29 атомов, были рассчитаны нетрадиционным методом сильной связи. Установлено, что вакансия стабильна только в положительно заряженном состоянии. Изучено влияние поверхностного гидрирования кластеров на стабильность и геометрию вакансии. Обнаружено, что симметрия вакансии меняется от тетраэдрической к пирамидальной.

ABSTRACT

Stability and deep local levels positions of the different charged vacancies in silicon nanosized cluster consisting of 29 atoms have been calculated by non-conventional tight-binding method. It is found that the vacancy is stable only in positively charged state. Effect of the surface hydrogenation of the clusters on stability and geometry of the vacancy was studied. The symmetry of the vacancy found to change from tetrahedral to pyramidal.

Ключевые слова: кластер кремния, нетрадиционный метод сильной связи, вакансия, пространственная конфигурация, запрещенная зона.

Keywords: silicon cluster, non-conventional tight-binding method, vacancy, spatial configuration, band gap.

В последнее время наночастицы кремния вызывают большой интерес в связи с уникальными свойствами. Они, так же как и кристаллический кремний, могут содержать различные дефекты, в том числе вакансии, которые могут повлиять на его оптоэлектронные и электрофизические свойства. Вакансия может появиться как внутри, так и на поверхности

наночастиц в процессе роста кристалла или под воздействием других факторов. На данный момент вакансия в кристаллическом кремнии была детально изучена [1-5]. Однако недостаточно внимания было уделено формированию [6-9] и исследованию пространственной и электронной конфигурации [6,7].

Влияние размеров на образование вакансий изучалось в [6], и было обнаружено, что уменьшение размера кластера облегчает образование вакансий.

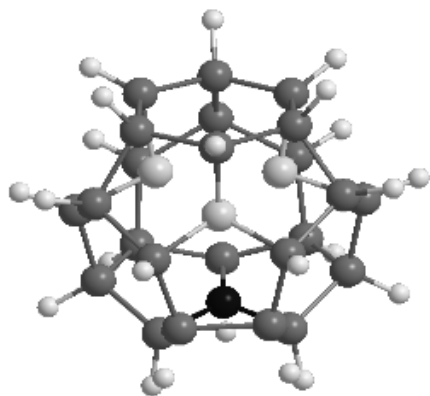
В данной работе приведены результаты компьютерного моделирования вакансии как в идеальном, так и поверхностно-гидрогенизированном кластере Si_{29}D нетрадиционным методом сильной связи [10]. В качестве модели наночастицы был выбран кластер Si_{29}D с димеризованной поверхностью. Модель вакансии построен путем удаления центрального атома из кластера.

Полученные результаты показывают, что вакансия в идеальном кластере Si_{29}D неустойчива и сжимается. В результате упорядоченность кластерной структуры уменьшается. Но для положительно заряженного кластера вакансия стабилизируется. Плотность энергетических состояний вакансии (таблица 1) в нейтральном Si_{29}D по форме совпадает с состоянием для идеального кластера и указывает также на его металлическую проводимость. Запрещенная зона этих кластеров растет с увеличением заряда на вакансии.

Таблица 1.

Энергии и заряды на атомах для идеального кластера и вакансии

Кластер	Энергия атомизации, эВ	Энергия атомизации на атом, эВ	Длина связи, Å	ВЗМО-НСМО щель, эВ
Si_{29}D	124,33	4,28	2,29	0,08
$\text{Si}_{28}\text{D}+\text{V}^0$	120,51	4,30	2,39	0,09
$\text{Si}_{28}\text{D}+\text{V}^-$	120,58	4,29	2,38	0,15
$\text{Si}_{28}\text{D}+\text{V}^+$	117,75	4,20	2,35	0,26

Рисунок 1. Структура вакансии в кластере $\text{Si}_{29}\text{H}_{24}$

Нами обнаружено, что при стабильном положении нейтральной вакансии в $\text{Si}_{29}\text{H}_{24}$ с пассивацией оборванных связей, четыре атома кремния, являющиеся первыми соседями вакансии, изменяют точеч-

ную симметрию с тетраэдрической на пирамидальную. Это происходит из-за эффекта Яна-Теллера. Три атома, показанные на рис. 1, сближаются, а четвертый атом Si удаляется. В этом случае расстояние между тремя атомами становится равным 3,19 Å (в идеале 3,75 Å) и 4,12 Å для удаляющегося атома. Следующие соседи вакансии также удаляются и длина между ними и первыми соседями становится равной 2,28 Å.

Заряды на атомах в присутствии вакансии приобретают отрицательный знак, что происходит в связи с оттоком электронов к центральным атомам. Как видно из таблицы 2, заряды на атомах двух координационных сфер больше, тогда как изменениями заряда на атомах третьей сферы можно пренебречь из-за малости значения. Вакансия приводит к перегруппировке связей между ближайшими соседями и вносит локальные глубокие уровни в энергетическую щель. Это объясняется образованием слабых ковалентных связей между соседними атомами вакансии.

Таблица 2.

Энергии и заряды на атомах для гидрогенизированного идеального кластера и вакансии в нем

Кластер	Полная энергия, эВ	ВЗМО-НСМО щель, эВ	Смещение первых соседей	Заряды на атомах				
				Центральный атом	1-сфера	2-сфера	3-сфера	Атомы водорода
$\text{Si}_{29}\text{H}_{24}$	181,39	1,02		0,20	-0,13	-0,14	0,01	0,05
$\text{Si}_{28}\text{H}_{24}\text{V}$	173,48	0,09	C_{3v} 3x(-0,56) 1x(+0,37)-	-0,08	-0,08	-0,08	-0,04	0,05

Список литературы:

- Baraff G.A., Schluter M. New self-consistent approach to the electronic structure of localized defects in solids. // Phys.Rev.B – 1980 – V.19 - N 10 - с.4965-4979.
- Lannoo M., Baraff G.A., Schluter M. Multiplet splitting and Jahn-Teller energies for vacancy in Si. // Phys.Rev.B – 1981 – V.24 - N 2 - с.955-963.

3. Хакимов З.М., Мухтаров А.п., Левин А.А. К вопросу о U-характере вакансии в кремнии //ФТП -1994 -Т.28 - вып. 4. - С.571-576.
4. Watkins G.D. A microscopic view of radiation damage in semiconductors. // Paris: Dunod – 1964 - с.97-111.
5. G.A. Baraff, E.O. Kane, M. Schluter Simple parameterized model for Jahn-Teller systems: Vacancy in p-type silicon. // Phys. Rev. B – 1980 – V.20 - с. 3563-3570.
6. Wolkin M.V., Jorne J., Fauchet P.M., Allan G., Delerue C. Electronic states and Luminescence in Porous silicon quantum dots: The Role of oxygen. //Phys. Rev. Lett. – 1999. – V. 82. - № 1. – P. 197-200.
7. Zhenkui Zhang, Ying Dai, Baibiao Huang, Myung-Hwan Whangbo. Quantum confinement effect on the vacancy-induced spin polarization in carbon, silicon, and germanium nanoparticles: Density functional analysis. // Appl. Phys. Lett. - 2010 – V.96 – с.062505.
8. Xianfang Zhu and Zhanguo Wang. Nanoinstabilities as revealed by shrinkage of nanocavities in silicon during irradiation. // Int. J. Nanotechnology – 2006 – V.3 - N. 4 – с.492-516.
9. M. N. Magomedov. State Equation of a Nanocrystal with Vacancies. // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques – 2018 – V.12 – N1 – с.185–196.
10. Z. M. Khakimov. A new semiempirical electronic structure and total energy calculation method for solids and large molecules. //Comput. Mater. Sci. -1994 – V.3 - с.95-108.