Uzbek Journal of Physics
DOI: https//doi.org/10.52304/.v25i4.481

Письмо в редколлегию

Структурные особенности кластера кремния $Si_{29}H_{36}$ с вакансией, допированного примесными атомами O и C

Ш.М. Махкамов, Н.Т. Сулайманов*, А.Б. Нормуродов, М.Н. Эрдонов, С. Эгамов

Институт ядерной физики АН РУз, посёлок Улугбек, ул. Хорасан 1, 100214, Ташкент, Узбекистан

Получена 14.05.2023, revised 28.12.2023

*Corresponding author: e-mail sulaymon@inp.uz, Phone: +998 99 856 19 41

Методом компьютерного моделирования в приближении функционала локальной плотности изучено влияние вакансии на структурную модификацию кластеров $Si_{29}H_{36}$ и $Si_{29}VH_{36}$ при внедрении атомов O и C. Результаты расчетов показывают, что в безвакансионном кластере при одновременном внедрении атомов C и O образуется комплекс O_i-Si-C_i. В кластере с вакансией образуются комплексы типа 3H+C+Si и Si-O-V.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, нанокластер кремния, структура, внедрение примесей.

Using the method of computer simulation based on the density functional theory, the influence of vacancy on the structures of silicon clusters $Si_{29}H_{36}$ and $Si_{29}VH_{36}$ are calculated. It is shown that the simultaneous introduction of O and C atoms into the central coordination sphere of the cluster $Si_{29}H_{36}$ leads to formation of the O_i-Si-C_i complex. In the cluster with vacancy, the complexes 3H+C+Si and Si-O-V are formed.

Keywords:, silicon nanocluster, computer simulation, introduction of impurities, .

I. Введение

В технологии изготовления изделий полупроводниковой микроэлектроники широко используются различные способы легирования базового материала примесями. Присутствие собственных и примесных структурных дефектов в полупроводниковых кристаллах и нано-кластерах существенно изменяет электрофизические, фотоэлектрические, оптические свойства и структурные параметры.

Анализ литературных данных [1-3] показывает, что влияние на характеристики монокристаллического кремния технологических примесей углерода и кислорода по отдельности достаточно хорошо изучено, но совокупное влияние этих примесей, в особенности при заметном влиянии размерных квантовых явлений при переходе в нанокластеры, недостаточно выяснено. Это обусловлено, во-первых, значительными экспериментальными трудностями в выявлении нестабильных при комнатной температуре ультрадисперсных кластеров (с размерами ~1 нм); во-вторых, отсутствием единого теоретического подхода при расчетах энергетических характеристик, особенно при наличии вакансии.

Целью данной работы является изучение методом компьютерного моделирования изменений структурных параметров кремниевого нанокластера с вакансией $Si_{29}VH_{36}$ при допировании примесными атомами O и C.

При создании структурных моделей кластеров опирались на хорошо известные структурные параметры монокристаллического кремния [4]. Сферический алмазоподобный кластер $Si_{29}H_{36}$ вырезан из объемного кремния и содержит 3 координационные сферы. Поверхностные оборванные связи кластера насыщены 36 атомами водорода. Исходные структуры были созданы с

использованием программы расчетов ChemBio3D 11.0, когда центр координат совпадает с центральным T_d узлом. Введение вакансии в центр кластера $Si_{29}H_{36}$ не приводит к существеным изменениям структуры, лишь в окрестности вакансии меняются межатомные расстояния. На рис. 1 показана оптимизированная структура кластера $Si_{28}VH_{36}$, а в таблице приведены соответствующие параметры.

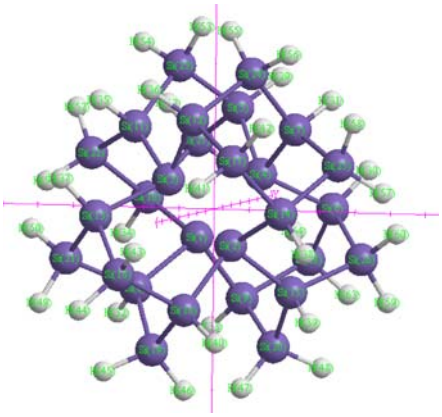


Рисунок 1. Оптимизированная структура нанокластера $Si_{28}VH_{36}$. Малые кружки – атом водорода, синие кружки – атом кремния. В центре – вакансия.

Большая вероятность нахождения углерода в междоузельном положении была подтверждена в работах [5-6].

Комплексы, образованные с участием одиночных атомов водорода в кремнии, содержащем атомы углерода, были обнаружены в DLTS экспериментах [7-8].

Проведенные расчеты по оптимизации структурных параметров кластеров $Si_{28}VH_{36}$ с разными примесными атомами с применением пакета программ ORCA4 [9] в приближении функционала локальной плотности показали снижение группы симметрии (см. таблицу).

Введение примесного атома углерода в любое междоузлие внутри 1-координационной сферы нанокластера $Si_{28}VH_{36}$ приводит к перемещению этого атома в центральное T_d положение и образованию примеси замещения, а симметрия ядра наночастицы понижается от T_d до C_{2v} и образуется дефект Si-C-Si.

Аналогично введение одного атома кислорода приводит к образованию устойчивой связи с двумя окружающими атомами кремния и образуется дефектный комплекс из междоузельного атома кислорода и вакансии на центральном T_d узле (A-центр). В результате возникают дефектные комплексы Si-C-Si и Si-O-Si. На рис. 2 для примера показана структура кластера $Si_{29}C_iH_{36} \rightarrow Si_{28}C_sH_{36}$.

Таблица. Межатомные расстояния и группы симметрии в областях образования дефектов при внедрении примесных атомов O и C в наночастицых $Si_{29}H_{36}$ и $Si_{28}VH_{36}$.

Наночастица	Группа симметрии G_s	Межатомные расстояния, Å	Наночастица	Группа симметрии G_s	Межатомные расстояния, Å
$Si_{29}H_{36}$	T_d	$R_{Si\text{-}Si}$=2.384	$Si_{28}VH_{36}$	T_d	$R_{Si\text{-}Si}$=2.528 $R_{V\text{-}Si}$=2.11
$Si_{29}C_iH_{36}$	C_∞	$R_{Si\text{-}Si}$=3.179 $R_{Si\text{-}C}$=1.947	$Si_{28}VC_iH_{36}$ $\rightarrow Si_{28}C_sH_{36}$	C_{2v}	$R_{Si\text{-}Si}$=3.236 $R_{V\text{-}C}$=0.928 $R_{V\text{-}Si}$=1.98 $R_{Si\text{-}C}$=1.723 $R_{Si\text{-}C}$=1.549
$Si_{29}O_iH_{36}$	C_∞	$R_{Si\text{-}Si}$=3.424 $R_{O\text{-}Si}$=2.097	$Si_{28}VO_iH_{36}$ $\rightarrow Si_{28}O_sH_{36}$	C_{2v}	$R_{V\text{-}O}$=1.257 $R_{O\text{-}Si}$=1.708 $R_{V\text{-}Si1,2}$=2.408 $R_{V\text{-}Si3,4}$=2.074
$Si_{29}O_iC_iH_{36}$	C_{2v}	$R_{Si\text{-}C}$=1.851 $R_{Si\text{-}O}$=1.669 $R_{Si\text{-}Si}$=≈2.4 $R_{Si\text{-}Si}$=≈3 $R_{O\text{-}C}$=2.838	$Si_{28}VO_iC_iH_{36}$	C_{2v}	$R_{V\text{-}O}$=1.718 $R_{V\text{-}C}$=1.511 $R_{V\text{-}Si}$=≈2.9 $R_{V\text{-}Si4}$=≈3.2 $R_{O\text{-}C}$=2.84

Примечание: G_s − группа симметрии в локальной области образования дефекта.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2023 г.

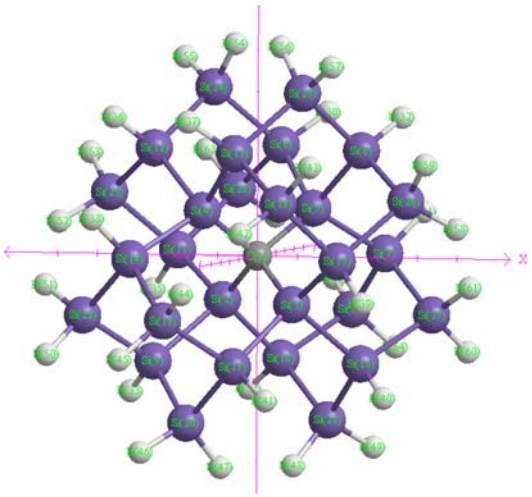


Рисунок 2. Оптимизированная структура нанокластера $Si_{29}C_iH_{36}$. В центре кластера – атом углерода, синий – атом кремния. Малые кружки – атомы водорода.

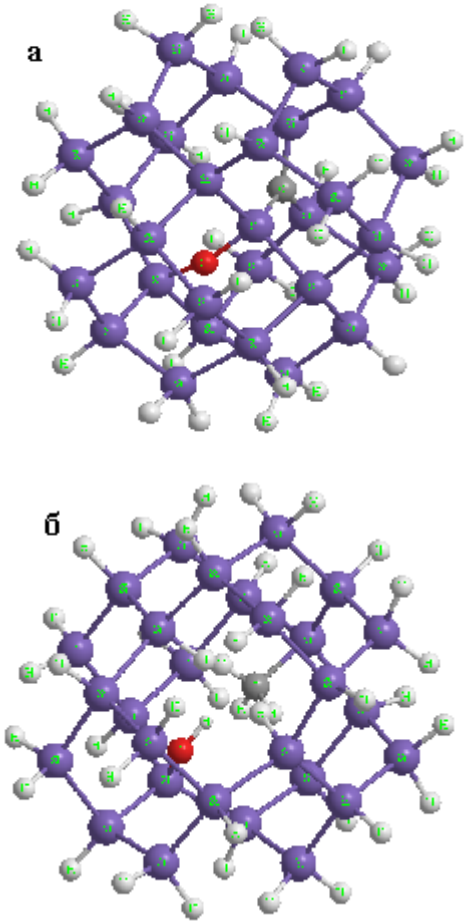


Рисунок 3. Оптимизированная структура нанокластеров $Si_{29}C_iO_iH_{36}$ (а) и $Si_{28}VC_iO_iH_{36}$.(б). Кружки: красный – атом кислорода, серый – атом углерода, синие – атомы кремния, малые кружки – атомы водорода

На рис. 3 приведены структуры кластеров $Si_{29}O_iC_iH_{36}$ и $Si_{28}VO_iC_iH_{36}$ при одновременном внедрении атомов углерода и кислорода.

Как видно, структура образующихся комплексов в нанокластере зависит от наличия вакансии. В кластере без вакансии атомы С и О располагаются по обе стороны атома Si, образуя комплекс O_i-Si-C_i. В нанокластере $Si_{28}VO_iC_iH_{36}$ образуются дефектные комплексы [3H+C+Si] и [Si-O-V].

Межатомные расстояния и кристаллографические параметры приведены в таблице. Из значений расстояний между вакансией и атомами примесей видно, что атом углерода как при внедрении в бездефектный кластер, так и при наличии вакансии стремится занять узел кристаллической решетки и образует равновесные связи с окружающими атомами кремния. Моделирование для атома кислорода показало, что атом О занимает междоузельное положение с образованием дефекта Si-O-Si в бездефектном кластере $Si_{29}H_{36}$ (аналогично внедрению атома С в $Si_{29}H_{36}$).

Если в $Si_{28}VH_{36}$ одновременно ввести атомы О и С, то симметрия понижается от T_d до C_{2v} и образуются дефектные комплексы Si-C-3H и Si-O-H. В случае внедрения только атома О образуетя устойчивая связь кислорода с двумя атомами кремния, т.е. 2Si-O-V. Если при введении атома углерода в центре наночастицы имеется вакансия и кислород, то наблюдается одновременное образование дефектов Si-C-3H и Si-O-V (аналог *A*-центра в монокристалле) вблизи центрального T_d узла (рис. 2).

Таким образом, компьютерное моделирование и анализ результатов расчетов структурных параметров показывают, что присутствие в кластере вакансии сильно влияет на его структуру. При внедрении атомов С и О по одному возникают комплексы Si-C-Si и Si-O-Si. Одновременное внедрение атомов О и С в кластер $Si_{29}H_{36}$ приводит к понижению симметрии, но не разрушает кластер, в этом случае внутри кластера образуются дефекты двух типов − Si-C-3H и Si-O-H.

Structural peculiarities of the silicon cluster $Si_{29}H_{36}$ with vacancy doped by O and C atoms

Sh.M. Makhkamov, N.T. Sulaymanov, A.B. Normurodov, M.N. Erdonov, S. Egamov

©Академия наук Республики Узбекистан, 2023 г.

Institute of Nuclear Physics, Academy of Sciences of the RUz, Ulugbek township, Khorasan 1, 100214, Tashkent, Uzbekistan

Using the method of computer simulation based on the density functional theory, the influence of vacancy on the structures of silicon clusters $Si_{29}H_{36}$ and $Si_{29}VH_{36}$ are calculated. It is shown that the simultaneous introduction of O and C atoms into the central coordination sphere of the cluster $Si_{29}H_{36}$ leads to formation of the O_i-Si-C_i complex. In the cluster with vacancy, the complexes 3H+C+Si and Si-O-V are formed.

Keywords:, silicon nanocluster, computer simulation, introduction of impurities,

Литература (References)

[1] V.S. Vendamani, Syed Hamad, V. Saikiran, A.P. Pathak, Venugopal S. Rao, Ravi Kanth Kumar, Nageswara S. Rao. J. Mater. Sci. **50**, 1666-1672 (2015).
[2] E.L. Zhavzharov, T.V. Kritskaya, V.M. Matyushin, Yu.M. Chashinov. Nekotorie osobennosti povedeniya vodoroda v kristallicheskom kremnii. (Moskva, Metallurguya, No.2, 137-145 (2013).
[3] V.I. Fistul'. Atomi legiruyushikh primesey v poluprovodnikakh. (Moskva, Fiz.-mat.lit. 2004).
[4] A.V. Bogomaz, T.V. Kritskaya, A.N. Ryabetc. Izvestiya VUZov. Materiali elektronnoi tekhniki No.3, 17-20 (2009.
[5] Vladimir P. Markevich, B. Hourahine, R.C. Newman, R. Jones, Mats Kleverman, J. Lennart Lindström, L.I. Murin, Masashi Suezawa, Sven Öberg, Patrick R. Briddon. Defect and Diffusion Forum 221-223. Online 2003.11.11. https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.221-223
[6] F. Weigend, R. Ahlrichs. Phys. Chem. Chem. Phys, **7**, 3297-3305 (2005). https://doi.org/10.1039/b508541a.
[7] S. Yoo, N. Shao, X.C. Zeng. Phys. Lett A **373**, 3757–3760 (2009).
[8] L.V. Spivak, N.E. Shepina. Fiziko-khimicheskie osnovy proctessov mikro- i nanotekhnologii. (Perm', Perm'skiy gosudarstvenniy natcional'ny iccledovatel'ski universitet. Electronnie dannie – 2018).
[9] Frank Neese. Software update: the ORCA program system. Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci. **2**, 73–78 (2012).

Вакансияли $Si_{29}H_{36}$ кремний кластерига О ва С атомлар киритилганда ўзига хос структуравий хусусиятлари

Ш.М. Махкамов, Н.Т. Сулайманов, А.Б. Нормуродов, М.Н. Эрдонов, С. Эгамов

Узбекистон Фанлар Академияси Ядро физикаси институти, Улугбек ша□арчаси, Хорасан куч., 1, 100214, Тошкент, Узбекистон

Зичлик функционали усулида маҳаллий зичлик яқинлашувида компьютерда моделлаштиришдан фойдаланган холда $Si_{29}H_{36}$ ва $Si_{29}VH_{36}$ кластерларининг О ва С атомлари киритилганда вакансиянинг структуравий ўзгаришига таъсири ўрганилди. Ҳисоблаш натижалари шуни кўрсатадики, вакансиясиз кластерда бир вақтнинг ўзида О ва С атомларини киритилганда O_i-Si-C_i комплекси ҳосил бўлади. Вакансияга эга бўлган кластерда 3H+C+Si ва Si-O-V типидаги комплекслар ҳосил бўлади.

Калит сўзлар: компьютерда моделлаштириш, кремний нанокластерлари, структура, киришма атомлар киритиш.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2023 г.