

Изменения структурных параметров нано-кластеров кремния при внедрении атома кобальта

Н.Т. Сулайманов
Институт ядерной физики АН РУз
Ташкент, Узбекистан
nadimbeksulaymanov@gmail.com

Ш.М. Махкамов
Институт ядерной физики АН РУз
Ташкент, Узбекистан
makhkamov@inp.uz

М.Ю. Ташметов
Институт ядерной физики АН РУз
Ташкент, Узбекистан
mannab@inp.uz

Ш.М. Назармаматов
Институт ядерной физики АН РУз
Ташкент, Узбекистан
nazarmamatov15@gmail.com

С.Р. Эгамов
Институт ядерной физики АН РУз
Ташкент, Узбекистан
egamov.s@inp.uz

М.Н. Эрдонов
Институт ядерной физики АН РУз
Ташкент, Узбекистан
erdonov@inp.uz

Аннотация — Данная работа посвящена именно изучению влияния примеси кобальта на формирования дефектных состояний в кремниевых нано-кластерах $\text{Si}_{29}\text{H}_{36}$ и $\text{Si}_{86}\text{H}_{70}$ с участием атомов кобальта и определению структурных параметров кластеров с применением методов компьютерного моделирования. По результатам исследований, внедрения Co приводит к структурным изменениям в области образования дефекта и образованию вырожденного глубокого уровня в запрещенной зоне нано-кластеров кремния. Предполагается, что образованные мелкие уровни вблизи потолка валентной зоны и дна зоны проводимости и их вырождение обусловлены дефектными центрами с участием Co, V_{Si} и вовлеченных атомом Co с поверхности атомов H.

Ключевые слова — нано-кластеры кремния, кобальт, водород, структура, запрещенная зона, глубокий уровень

I. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время самым востребованным материалом микро- и нано-электроники является монокристаллический кремний. С развитием технологических методов формирования низко-размерных состояний в объеме и на поверхности материала открываются широкие перспективы в управлении структурными параметрами и модификации их фундаментальных свойств [1]. Одним из таких способов является создание в объеме кристалла метастабильных нано-кластеров содержащих различных примесей [2-4].

Данная работа посвящена именно изучению влияния примеси кобальта на формирования дефектных состояний в кремниевых кластерах с участием атомов кобальта и определению структурных и энергетических зонных параметров кластеров с применением методов компьютерного моделирования [2], но в отличие от авторов, мы рассматриваем модели кластеров в рамках перво-принципных методов расчетов. Для определения структурных параметров и основных энергетических характеристик нано-кластеров $\text{Si}_{29}\text{H}_{36}$ и $\text{Si}_{86}\text{H}_{70}$ при внедрении примесного атома кобальта и его взаимодействии с вакансией мы применили пакет программ ORCA.

II. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

По результатам оптимизации структуры, в рассматриваемых кластерах кремния Co занимая центральный узел в кристаллической решетке кластеров $\text{Si}_{28}\text{H}_{36}:\text{Co}$ и $\text{Si}_{86}\text{H}_{70}:\text{Co}$, образует равновесные ковалентные связи с соседними атомами кремния и снижает в локальной дефектной области симметрию от T_d до C_{4h} . Если нано-кластер не содержит вакансию, большинство атомов Si заряжается положительно, а атом примеси Co и связанные ближайшие соседние атомы Si, а также поверхность кластера – отрицательно. При наличии в области образования примесного дефекта вакансии, кобальт занимает равновесносвязанное положение вблизи вакансии (см. табл.1). Оптимизированные геометрии нано-кластеров с дефектом имеют форму вытянутого эллипсоида и наличие вакансии способствует увеличению магнитуды дипольного момента. В пользу мета-стабильности такого состояния дефектного комплекса $[2\text{H}-\text{Co}-\text{V}_{\text{Si}}]$ говорит и то, что при внедрении в нано-кластеры кремния, атом кобальта вовлекает за собой атомы водорода от поверхности.

Таблица I. ИЗМЕНЕНИЯ СТРУКТУРНЫХ ПАРАМЕТРОВ ПРИ ВВЕДЕНИИ АТОМА КОБАЛЬТА В НАНО-КЛАСТЕРЫ КРЕМНИЯ

	D_{cluster} (Å)	R_1 (Å)	R_2 (Å)	R_3 (Å)	D (deby)
$\text{Si}_{28}\text{H}_{36}:[\text{Co}-\text{H}]$	10.98	2.28; 2.42	1.57	0.42	1.698
$\text{Si}_{27}\text{H}_{36}:[\text{H}-\text{Co}-\text{V}_{\text{Si}}]$	10.89	2.30	1.87	0.62	3.763
$\text{Si}_{86}\text{H}_{70}:[\text{H}-\text{Co}-\text{V}_{\text{Si}}]$	17.98	2.32	1.55	0.22	1.166
$\text{Si}_{85}\text{H}_{70}:[2\text{H}-\text{Co}-\text{V}_{\text{Si}}]$	18.01	2.26; 2.28	1.51	0.65	0.761

D_{cluster} – Расстояния между наиболее удаленными атомами H, нейтрализующими поверхностных атомов Si («диаметр» кластера); R_1 – Расстояния между атомом Co и первыми соседними атомами Si; R_2 – Расстояния между атомом Co и вовлеченными им атомами H; R_3 – Расстояния между атомом Co и V_{Si} ; D – магнитуда дипольного момента.

При введении кобальта также изменяется энергетическая зонная структура, запрещенные зоны кластеров $\text{Si}_{28}\text{H}_{36}:\text{Co}$ и $\text{Si}_{86}\text{H}_{70}:\text{Co}$ изменяются до $E_g = -5.04$ eV и $E_g = -3.17$ eV по сравнению с аналогичным параметром бездефектных $\text{Si}_{29}\text{H}_{36}$ и $\text{Si}_{86}\text{H}_{70}$ кластеров ($E_g = -5.63$ eV и $E_g = -3.02$ eV соответственно). Положения энергетических зон и энергетических уровней,

обусловленных образованием дефектных комплексов приведены на рисунке.

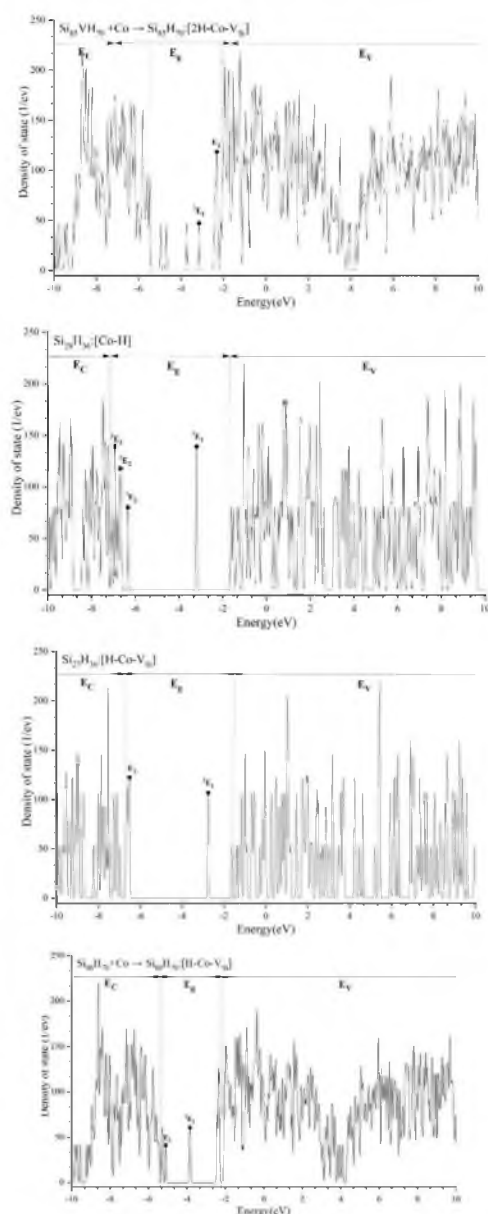
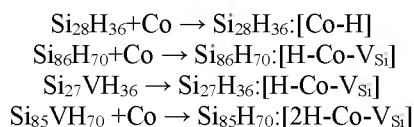


Рис. 1. Положения энергетических зон и уровней, обусловленных образованием дефектных центров при внедрении атома Co в нано-кластеры $\text{Si}_{28}\text{H}_{36}:\text{Co}$, $\text{Si}_{86}\text{H}_{70}:\text{Co}$ и $\text{Si}_{27}\text{H}_{36}:\text{Co}$ и $\text{Si}_{85}\text{H}_{70}:\text{Co}$

Появление в запрещенной зоне глуболежащего вырожденного уровня E_1 обусловлен внедрением примеси Co в решетку кластера и вырожденных мелких уровней E_2 , обусловленных дефектными комплексами, описываются следующими соотношениями:



для нано-кластеров с размерами примерно 1 и 2 нм и сопровождается вовлечением во внутрь нано-кластеров атомов H. Это приводит к изменению электрофизических параметров (см. табл.2).

Таблица II. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ НАНО-КЛАСТЕРОВ КРЕМНИЯ С ВНЕДРЕННЫМ АТОМОМ КОБАЛЬТА

	E_c (eV)	E_v (eV)	E_g (eV)	2E_1 (eV)	E_2 (eV)
$\text{Si}_{28}\text{H}_{36}:[\text{Co-H}]$	-6.638	-1.594	5.044	-3.191; -3.162	-6.318
$\text{Si}_{27}\text{H}_{36}:[\text{H-Co-V}_{\text{Si}}]$	-6.940	-1.614	5.326	-2.737; -2.735	-6.660; -6.581; -6.580; -6.522; -6.497; -6.497;
$\text{Si}_{86}\text{H}_{70}:[\text{H-Co-V}_{\text{Si}}]$	-5.454	-2.282	3.171	-3.849; -3.802	-5.288; -5.243; -5.084
$\text{Si}_{85}\text{H}_{70}:[2\text{H-Co-V}_{\text{Si}}]$	-5.279	-2.053	3.227	-3.336; -3.332	-2.376; -2.339; -2.320; -2.308; -2.253; -2.244; 2.212

$E_g = E_c - E_v$ (eV) – ширина запрещенной зоны; E_1 – глубокий уровень, обусловленный атомом кобальта; E_2 – мелкий уровень, обусловленный взаимодействием атома кобальта с вакансией и искривлением границ запрещенной зоны в локальной зоне образования дефекта, содержащего примесь;

III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, результаты компьютерного моделирования показали, что внедрения Co в нано-кластер кремния приводит к структурным изменениям в области образования дефекта и образованию вырожденного глубокого уровня в запрещенной зоне. Предполагаем, что образованные мелкие уровни вблизи потолка валентной зоны и дна зоны проводимости и их вырождение обусловлены образованием сложных дефектных центров с участием Co, V_{Si} и вовлеченных при внедрении атома Co с поверхности атомов H.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Суздаев, И.П. Нано-кластеры и нано-кластерные системы. Организация, взаимодействие, система / И.П. Суздаев, П.И. Суздаев // Усп. хим. – 2001. – Т. 70, № 3. – С. 203–240.
- [2] Guo, L.-J. Density-functional investigation of metal-silicon cage clusters $M_n\text{Si}_n$ ($M=\text{Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn}$; $n=8-16$) / L.-J. Guo, G.-F. Zhao, Y.-Z. Gu, X. Liu, Z. Zeng // Phys. Rev. B. – 2008. – Vol. 77. – P. 195417. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.195417>
- [3] Li, Y. Geometric, Electronic and Magnetic Properties of Transition Metal Doped Silicon Clusters, and Development of a Magnetic Deflection Setup / Y. Li. – 2016. – 150 p.
- [4] Ma, L. Structure and Electronic Properties of Cobalt Atoms Encapsulated in Si_n ($n = 1-13$) Clusters / L. Ma, J. Zhao, J.G. Wang, Q.L. Lu, Z.L. Zhu, G.H. Wang // Chem. Phys. Lett. – 2005. – Vol. 411. – P. 279.