

УДК 538.915

Горкавенко Т. В.¹, к.ф.-м.н., м.н.с.,
Плющай І. В.², к.ф.-м.н., доц.,
Плющай О.І.³, к.ф.-м.н., с.н.с.,
Макара В. А.⁴, д.ф.-м.н., проф.

T. V. Gorkavenko¹, PhD.,
I. V. Plyushchay², PhD.,
O. I. Plyushchay³, PhD.,
V. A. Makara⁴, Dr. Sci., Prof.

Ab initio розрахунок взаємодії домішки азоту з крайовою дислокацією в кремнії

Ab initio calculation of interaction between nitrogen impurity and edge dislocation in silicon

^{1,2,4}Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул. Володимирська 64/13,
³Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, 03142, м. Київ, бульв. Академіка Вернадського 36,
e-mail:¹ tvgorka@gmail.com

^{1,2,4}Taras Shevchenko National University of Kyiv, 01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
³G.V. Kurdyumov Institute for Metal Physics of the N.A.S. of Ukraine, 03142, Kyiv, Academician Vernadsky Boulevard, 36
e-mail: ¹ tvgorka@gmail.com

Проведено ab initio розрахунок взаємодії крайової дислокації з домішковими атомами азоту в надкомірці з 180 атомів кремнію. Розрахунок проведено методом функціоналу густини в узагальненому градієнтному наближенні. Отримано криву взаємодії домішкових атомів азоту з крайовою дислокацією в кремнії. Встановлено рівноважне положення домішкових атомів поблизу ядра дислокації, обраховані енергії зв'язку домішкових атомів азоту з крайовою дислокацією. Представлені та проаналізовані електронні спектри обраної надкомірки при різних положеннях домішок. Результати розрахунків проаналізовано з точки зору можливості виникнення зонного магнетизму.

Ключові слова: кремній, електронна структура, крайова дислокація, домішка азоту, магнітне впорядкування.

Ab initio calculations of interaction of the edge dislocation with nitrogen impurity atoms in supercell composed of 180 Si atoms are presented. The density functional theory in the general gradient approximation has been used for numerical calculation. The interaction curve of nitrogen impurities with the edge dislocation in silicon was obtained. The equilibrium positions of impurity atoms in the vicinity of the edge dislocation cores are calculated. The binding energy of nitrogen impurity atoms with edge dislocation is 5.05 eV per nitrogen atom, indicating the possibility of formation of impurity atmospheres around dislocation cores. The electronic spectra of supercell (composed of 180 Si atoms) with dipole of two edge dislocations with nitrogen impurities in different positions are presented and analyzed. In general, the obtained spectra correspond to the spectra of pure Si, the main difference is formation narrow impurity peak nearly Fermi level in the case, when nitrogen atom is in the vicinity of the edge dislocation cores. Results of calculations are analyzed in terms of the possible formation of the band magnetism.

Key Words: silicon, electronic structure, edge dislocation, nitrogen impurity, magnetic ordering.

Статтю представив член-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Макара В.А.

Вступ

Відомо, що електрофізичні властивості кремнію сильно залежать від наявності та взаємодії дефектів, що й досі є об'єктом інтенсивного дослідження. Наприклад, в роботі [1] було показано, що легування азотом кремнію призводить до сильного зміцнення вихідних кристалів. Нам відомо лише кілька робіт по розрахунку енергії взаємодії точкових дефектів з дислокаціями в кремнії, наприклад, [2]. Також з'являються нові експериментальні дані про вплив магнітного поля на домішково-

дислокаційну взаємодію в кремнії, але поки що не існує послідовної теорії, яка б пояснювала вплив магнітного поля на дефектну структуру діамантних напівпровідників [3].

Отже, метою роботи є дослідження електронної структури кремнію з домішковим азотом в ядрі крайової дислокації та аналіз можливості формування магнітних моментів на обірваних зв'язках.

Результати розрахунку та їх обговорення

Проведено *ab initio* розрахунки повної енергії та електронних спектрів надкомірки зі 180 атомів

Si, що містить диполь з двох крайових дислокацій та два атоми азоту в області ядра дислокації, при різних положеннях азоту. Розрахунки проводились методом функціоналу густини в узагальненому градієнтному наближенні за допомогою пакета програм ABINIT.

На рис. 1 показано криву залежності повної енергії від положення атомів азоту, яка по вигляду відповідає потенціалу парної взаємодії Ленарда-Джонса, що свідчить про адекватність наших розрахунків. Рівноважне положення домішкових атомів азоту на $\sim 0,5\%$ ближче до ядра дислокації у порівнянні з положенням атома кисню поблизу ядра дислокації [3]. Енергія зв'язку атомів азоту з крайовою дислокацією становить 5,05 еВ на один атом азоту.

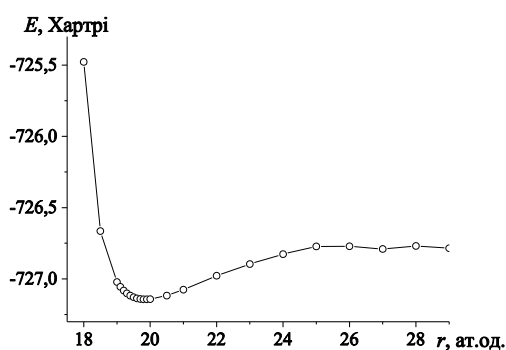


Рис. 1. Залежність повної енергії надкомірки Si від положення домішок.

Приклади електронних спектрів надкомірки з різним положенням домішкового азоту показано на рис. 2. У випадку положення азоту, коли повна енергія надкомірки виходить на полицю, в забороненій зоні з'являється гострий пік під зоною провідності. Рівень Фермі попадає майже на максимум цього піка. У випадку рівноважного

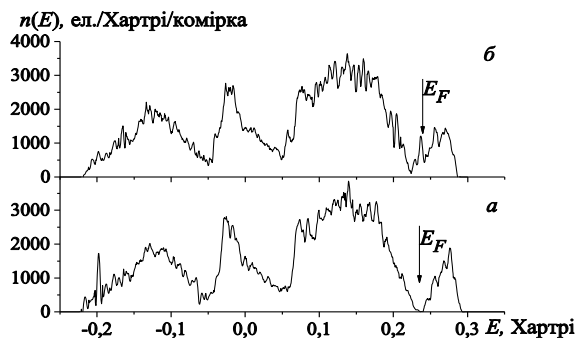


Рис. 2. Густина електронних станів надкомірки Si: а – рівноважне положення N, б – повна енергія надкомірки виходить на полицю.

положення азоту домішковий пік зникає внаслідок пасивації обірваних зв'язків.

За критерієм Стонера, для виникнення магнітного впорядкування необхідна наявність напівзаповненої вузької підзони в околі рівня Фермі [3]. Якраз таким є домішковий пік (див. рис. 2 б) у випадку, коли повна енергія надкомірки виходить на полицю. Отже, в даному випадку може відбуватись формування магнітних моментів на обірваних зв'язках.

Висновки

Встановлено рівноважне положення атомів азоту поблизу дислокацій в кремнії. Значення енергії зв'язку атомів азоту з крайовою дислокацією свідчить про можливість утворення домішкових атмосфер навколо ядра дислокації. Розрахунки проаналізовано з точки зору можливості виникнення зонного магнетизму.

Список використаних джерел

1. Sumino K., Imai M. Interaction of dislocations with impurities in silicon crystals studied by in situ X-ray topography / K. Sumino, M. Imai // Philosophical Magazine A. – 1983. – V. 47, No 5, P. 753 – 766.
2. Masuda-Jindo K, Kojima K., Kawado S. Atomistic simulation study on dislocation locking by impurity clusters in Si crystal / K. Masuda-Jindo, K. Kojima, S. Kawado. –North-Holland: Elsevier Science Publishers, 1990. – 1369 P.
3. Plyushchay I.V., Plyushchay O.I., Makara V.A. Ab initio calculation of magnetic interaction between edge dislocation and oxygen impurity in silicon / I.V. Plyushchay, O.I. Plyushchay, V.A. Makara // Metallofizika i Noveishie Tekhnologii. – 2014. – V. 36, No 5, P. 589–596.

References

1. SUMINO, K., IMAI, M. (1983) Interaction of dislocations with impurities in silicon crystals studied by in situ X-ray topography. Philosophical Magazine A. 47 (5), p. 753-766.
2. MASUDA-JINDO, K., KOJIMA, K., KAWADO, S. (1990) Atomistic simulation study on dislocation locking by impurity clusters in Si crystal. North-Holland: Elsevier Science Publishers.
3. PLYUSHCHAY, I. V., PLYUSHCHAY, O. I. and MAKARA, V. A. (2014) Ab initio calculation of magnetic interaction between edge dislocation and oxygen impurity in silicon. *Physics of Metals and Advanced Technologies*. 36 (5).p. 589-596.

Надійшла до редколегії 20.02.17