

PACS numbers: 61.72.Lk, 71.15.Mb, 71.20.Mq, 71.55.Cn, 75.10.Lp

***Ab initio* розрахунок магнітної взаємодії крайової дислокації та домішки кисню в кремнії**

І. В. Плющай, О. І. Плющай*, В. А. Макара

*Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
фізичний факультет,
вул. Володимирська, 60,
01601 Київ, Україна*

**Інститут металлофизики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,
бульв. Акад. Вернадського, 36,
03680, МСП, Київ-142, Україна*

Методом функціоналу густини в узагальненому градієнтному наближенні розраховано електронний спектр крайової дислокації в кристалічному кремнії та електронний спектр надкомірки з 64 атомів кремнію, що містить домішковий атом кисню у міжвузловинному положенні. Обговорюються зміни густини електронних станів надкомірки, що містить дефект, та можливість формування магнітного порядку. Спін-поляризований розрахунок підтвердив можливість формування магнітного порядку через розглянуті дефекти з некомпенсованими магнітними моментами: $1,25\mu_B$ на надкомірку, що містить два відрізки дислокації одиничної довжини, або $1,75\mu_B$ на домішку кисню. Теоретично показано можливість формування магнітних моментів на оборваних зв'язках в ядрі крайової дислокації та домішках кисню в кремнії, що може призводити до виникнення додаткової магнітної взаємодії між крайовою дислокацією та домішкою кисню в кремнії.

Методом функционала плотности в обобщённом градиентном приближении рассчитаны электронный спектр краевой дислокации в кристаллическом кремнии и электронный спектр сверхъядчейки из 64 атомов Si, содержащей примесный атом кислорода в междоузельном положении. Обсуждаются изменения плотности электронных состояний сверхъядчейки, содержащей дефект, и возможность формирования магнитного порядка. Спин-поляризованный расчёт подтвердил возможность формирования магнитного порядка из-за рассмотренных дефектов с некомпенсированными магнитными моментами: $1,25\mu_B$ на сверхъядчейку, содержащую два отрезка дислокации единичной длины, или $1,75\mu_B$ на примесь кислорода. Теоретически показана возможность формирования магнитных моментов на оборванных связях в ядре краевой дислокации и примесях кислорода в

кремнії, что может приводить к возникновению дополнительного магнитного взаимодействия между дислокацией и примесью кислорода в кремнии.

Both the electronic spectrum of the edge dislocation in crystalline Si and the electronic spectrum of supercell with 64 Si atoms and one oxygen atom in the interstitial position are calculated, using the density functional theory within the generalized gradient approximation. Changes in the electron density of states of the supercell with defect as well as the possible formation of magnetic order are discussed. The spin-polarized calculation confirms the possibility of magnetic order due to the considered defects with the uncompensated magnetic moments, namely, $1.25\mu_B$ per supercell containing two segments of the unit-length dislocation line or $1.75\mu_B$ per one O atom. The formation of magnetic moments on the dangling bonds in the dislocation core and on the oxygen impurities that leads to the additional magnetic interaction between dislocation and oxygen impurity in silicon is theoretically investigated.

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

(Отримано 21 листопада 2013 р.)

1. ВСТУП

Монокристалічний кремній є основою сучасної мікроелектроніки. Наявність та взаємодія дефектів в монокристалах кремнію впливає на технологічно важливі властивості елементів електронних пристроїв [1]. Відомо, що взаємодія дислокацій з точковими домішками, зокрема киснем, визначає швидкість руху дислокацій, а отже і механічні властивості кремнієвих пластин. Останнім часом з'явилися нові експериментальні дані про вплив магнітного поля на взаємодію між домішковим киснем та дислокаціями в кремнії [2]. На сьогоднішній день не існує послідовної теорії, яка б дозволяла пояснити вплив магнітного поля на дефектну структуру діамагнітних напівпровідників. Більшість дослідників трактує наявність феромагнітних проявів у таких в цілому діамагнітних матеріалах з точки зору, так званого, *sp*-магнетизму на дефектах [3].

В даній статті теоретично проаналізовано можливість формування магнітних моментів на обірваних зв'язках в ядрі крайової дислокації та домішках кисню в кремнії, що може призводити до виникнення додаткової магнітної взаємодії між крайовою дислокацією та домішкою кисню в кремнії.

2. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКІВ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Розрахунок виконувався методом функціоналу густини [4] в уза-

гальненому ґрадієнтному наближенні [5] за допомогою пакета програм ABINIT [6]. Числовий відпал положень атомів виконувався за алгоритмом, який описаний в [7].

Для розрахунку електронного спектра крайової дислокації нами було обрано надкомірку, що містить 192 атоми Si ($a_x = 4a(1\ 1\ 1)$, $a_y = 2a(1\ -1\ 0)$, $a_z = a(1/2\ 1/2\ -1)$, де $a = 10,2665a_0$ — період ґратниці монокристалічного кремнію в радіусах Бора a_0). Половина атомів з однієї атомної площини (12 атомів) були видалені так, що утворився диполь з двох крайових дислокацій, що можуть рухатися в площині ковзання (111). Періодичне повторення цієї надкомірки в просторі формує своєрідний «ліс» з паралельних дислокацій густиною $\sim 10^{13}\text{ см}^{-2}$. Зрозуміло, це досить висока концентрація дислокацій, яка може реалізуватися лише поблизу межі гетеропереходу в епітаксійних гетероструктурах на основі Si [8] або бути модельним об'єктом для аналізу особливостей електронної структури поблизу ядра дислокації.

Було виконано чисельний відпал «вихідної» дефектної надкомірки. На першому етапі відпалу атомні позиції змінювалися відповідно до діючих на атоми сил, розрахованих з перших принципів. На другому етапі чисельного відпалу крім зміни атомних позицій було дозволено також зміну розмірів надкомірки вздовж вектора Бюргерса, відповідно до діючих напружень.

На рисунку 1, б представлено енергетичну залежність густини електронних станів «зреласованої» надкомірки, що містить кра-

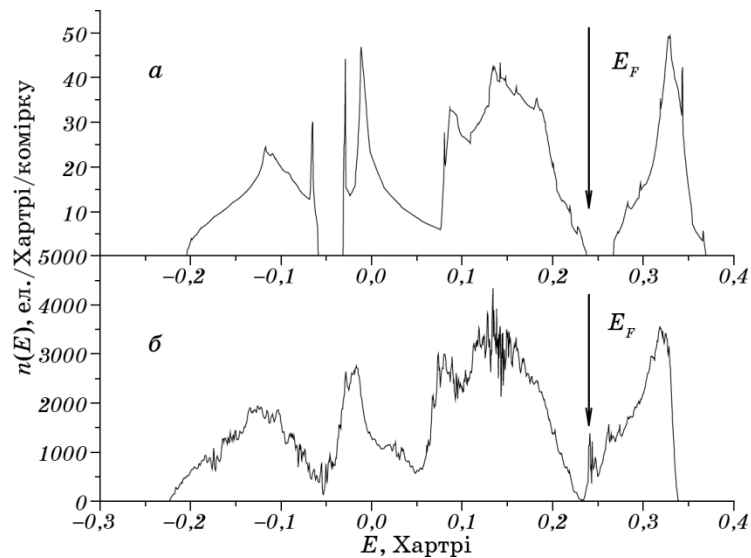


Рис. 1. Енергетична залежність густини електронних станів: *а* — кристалічного Si, *б* — надкомірки, що містить дислокаційний диполь.

йову дислокацію. Основною відмінністю розрахованого електронного спектра дислокаційної надкомірки в порівнянні зі спектром монокристалічного Si (рис. 1, *a*) є наявність гострого асиметричного піка в забороненій області під зоною провідності. Рівень Фермі, позначений на рисунках стрілочками, потрапляє в область вищезначеного піка. Аналіз локальних електронних спектрів дозволяє зв'язати цей субпік з обірваними ненасиченими зв'язками на атомах кремнію в ядрі дислокації [9]. Одержаний електронний спектр якісно корелює зі схемою зонної структури, відтвореною в [8] за результатами попередніх теоретичних оцінок та експериментальних досліджень гетеропереходу монокристалічний кремній–дислокаційний кремній.

Наявність частково заповненого гострого піка (дислокаційної підзони) в електронному спектрі надкомірки, згідно з критерієм Стокера, може призводити до виникнення магнітного впорядкування за зонною схемою.

Для перевірки цього припущення нами було виконано *ab initio* спіно-поляризований розрахунок дислокаційної надкомірки (рис. 2). Виконаний розрахунок підтвердив, що основним буде дійсно спіно-поляризований стан електронної підсистеми з виграшем по енергії 0,015 еВ ($5 \cdot 10^{-4}$ Хартрі) та магнітним моментом $1,25 \mu_B$ на надкомірку, що містить два відрізки (диполь) крайової дислокації одиничної довжини.

Таким чином ми теоретично показали можливість існування ма-

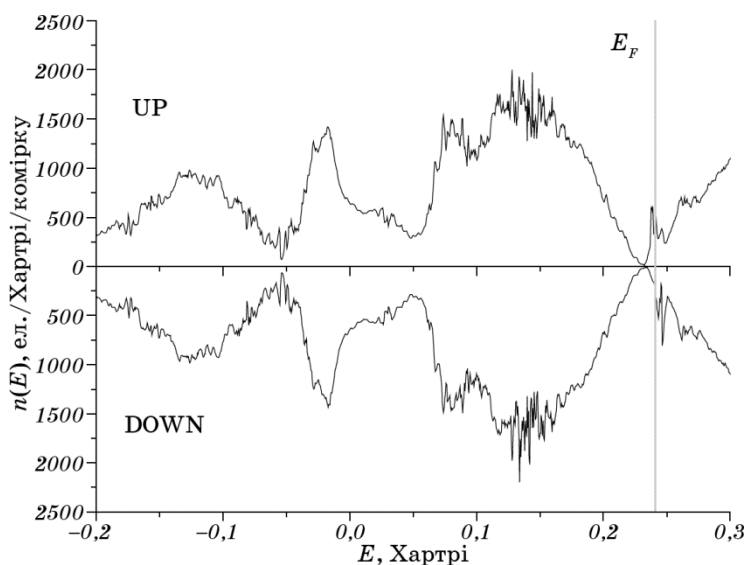


Рис. 2. Спіно-поляризований електронний спектр надкомірки, що містить крайову дислокацію.

гнітного впорядкування на обірваних зв'язках крайової дислокації в кремнії, що корелює з експериментальними результатами [10].

Для з'ясування електронного стану домішок кисню в кремнії нами було розраховано криві густини електронних станів надкомірки кремнію з 64 атомів, що містила домішковий атом кисню в міжвузловинному положенні (рис. 3, *a*). Відповідна концентрація домішок $\cong 1,5\%$ (10^{20} см^{-3}). Попередні дослідження [11] особливостей електронного стану домішок кисню в кремнії дозволили довести, що домінуючим станом кисню в кремнії є міжвузловинне положення; спостерігається перерозподіл електронної густини від атома кисню до навколишніх атомів кремнію (домішковий атом набуває локального позитивного заряду); згідно з критерієм Стонера на домішковому атомі кисню в міжвузловинному положенні може формуватися магнітний момент.

Однак слід зазначити, що попередні дослідження було виконано без урахування можливості зміни положення атомів кремнію навколо домішкового атома, тобто без розгляду деформації ґратниці навколо домішки. В представленій роботі було виконано числовий відпал положень атомів за алгоритмом [7].

Положення атомів кремнію навколо домішкового атома кисню змінювались відповідно до сил, розрахованих з перших принципів. Відповідно до виконаних розрахунків, атоми першої координаційної сфери навколо міжвузловинного O зміщуються до домішкового атома на 6,9%, атоми ж другої та третьої координаційних сфер на-

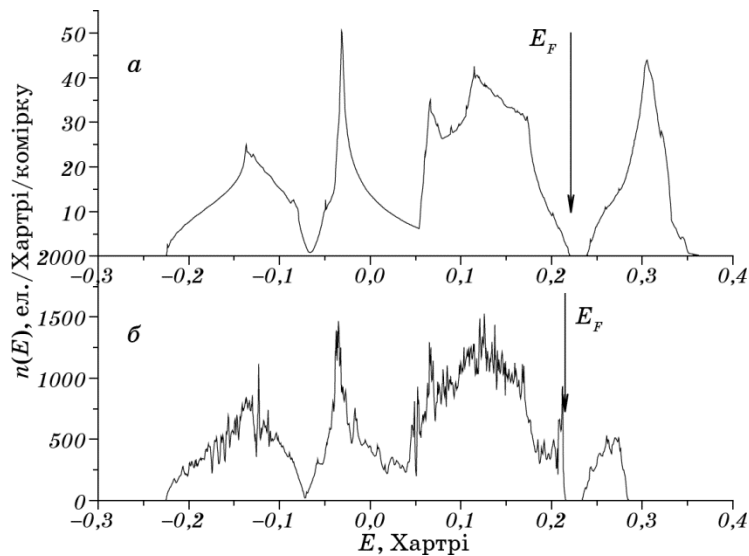


Рис. 3. Енергетична залежність густини електронних станів: *a* — кристалічного Si, *б* — надкомірки, що містить домішку кисню.

впаки зміщуються від домішкового атома на 3,1% та 0,9% відповідно. Зміщення атомів наступних координаційних сфер (всього наша надкомірка містить атоми до 9-ої координаційної сфери включно) незначні і згасають відповідно до віддалення від домішкового атома. Виграш енергії електронної підсистеми надкомірки за рахунок релаксації атомних позицій навколо зануреного кисню становить 0,2 еВ ($7 \cdot 10^{-3}$ Хартрі).

На рисунку 3, б представлено енергетичну залежність густини електронних станів $n(E)$ надкомірки Si з 64 атомів, що містить один міжвузловинний атом О. Для порівняння на рис. 1, а наведено електронний спектр монокристал кремнію без домішок.

В цілому одержані спектри підтверджують наші попередні результати, одержані без врахування релаксації ґратниці [11]. Спостерігається формування вузького додаткового піка в забороненій зоні безпосередньо над валентною зоною. Аналіз локального спектра атома кисню дозволяє зв'язати цей пік саме з електронними станами домішкового атома О. Принциповим є те, що домішкова підзона електронних станів О в міжвузловинному стані є дуже вузькою (пласкою) і частково заповненою. Останнє, згідно з критерієм Стонера, може призводити до виникнення магнітного моменту на домішковому атомі.

Спін-поляризований розрахунок підтвердив можливість формування магнітного впорядкування на домішках кисню (рис. 4). Нескомпенсований магнітний момент становить $1,75 \mu_B$ на домішку

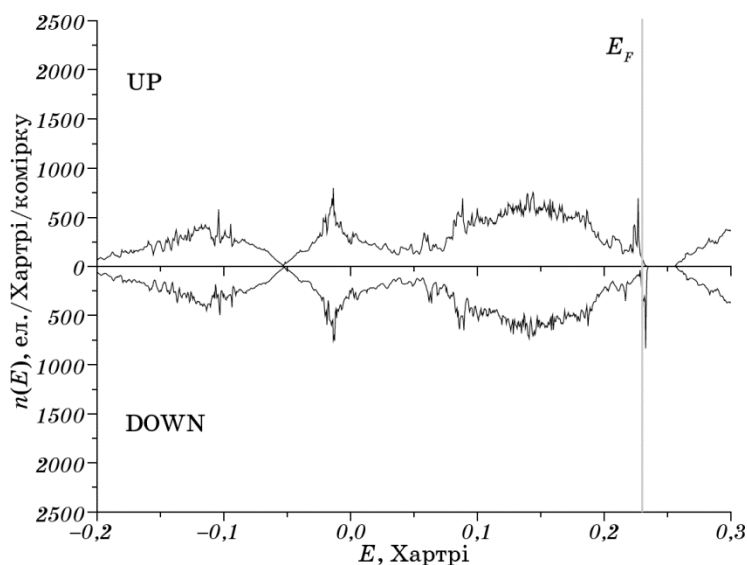


Рис. 4. Електронний спектр надкомірки Si, що містить домішку кисню, з урахуванням спінової поляризації.

КИСНЮ.

3. ВИСНОВКИ

Таким чином, теоретично показана можливість формування магнітних моментів на обірваних зв'язках крайової дислокації в кремнії та на домішковому атомі кисню в міжвузловинному положенні, що може призводити до додаткової магнітної взаємодії між дислокацією та домішковими атомами кисню. Останнє, як вже зазначалося, має експериментальне підтвердження [2].

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. *Defects in Microelectronic Materials and Devices* (Eds. D. M. Fleetwood, S. T. Pantelides, and R. D. Schrimpf) (London–New York: CRC Press: 2008).
2. I. Yonenaga and K. Takahashi, *J. Appl. Phys.*, **101**: 053528 (2007).
3. *Carbon Based Magnetism: An Overview of the Magnetism of Metal Free Carbon-Based Compounds and Materials* (Eds. T. Makarova and F. Palacio) (Elsevier Science: 2006).
4. X. Gonzea, B. Amadond, P.-M. Angladee, J.-M. Beukena, F. Bottind, P. Boulanger, F. Brunevalq, D. Calistej, R. Caracasl, M. Côté, T. Deutschj, L. Genovesei, Ph. Ghosezk, M. Giantomassia, S. Goedeckerc, D. R. Hamannm, P. Hermetp, F. Jolletd, G. Jomardd, S. Leroux, M. Mancinid, S. Mazevedt, M. J. T. Oliveiraa, G. Onidab, Y. Pouillona, T. Rangela, G.-M. Rignanesea, D. Sangallib, R. Shaltafa, M. Torrentd, M. J. Verstraetea, G. Zerahd, and J. W. Zwanzigerf, *Comput. Phys. Comm.*, **180**: 2582 (2009).
5. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.*, **77**: 3865 (1996).
6. <http://www.abinit.org/>
7. H. B. Schlegel, *J. Comput. Chem.*, **3**: 214 (1982).
8. A. A. Shklyayev, F. N. Dultsev, K. P. Mogilnikov, A. V. Latyshev, and M. Ichikawa, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **44**: 025402 (2011).
9. І. В. Плющай, В. А. Макара, О. І. Плющай, *Металлофиз. новейшие техн.*, **33**, спецвып.: 157 (2011).
10. V. M. Tsmots, P. G. Litovchenko, Yu. V. Pavlovskyy, and M. M. Luchkevych, *Ukr. J. Phys.*, **54**, No. 10: 1007 (2009).
11. І. В. Плющай, В. А. Макара, *Доповіді Національної академії наук України*, № 3: 110 (2009).

REFERENCES

1. *Defects in Microelectronic Materials and Devices* (Eds. D. M. Fleetwood, S. T. Pantelides, and R. D. Schrimpf) (London–New York: CRC Press: 2008).
2. I. Yonenaga and K. Takahashi, *J. Appl. Phys.*, **101**: 053528 (2007).
3. *Carbon Based Magnetism: An Overview of the Magnetism of Metal Free Carbon-Based Compounds and Materials* (Eds. T. Makarova and F. Palacio) (Elsevier Science: 2006).

4. X. Gonze, B. Amadon, P.-M. Anglade, J.-M. Beukena, F. Bottin, P. Boulanger, F. Bruneval, D. Caliste, R. Caracas, M. Côté, T. Deutsch, L. Genovese, Ph. Ghosez, M. Giantomassi, S. Goedecker, D. R. Hamann, P. Hermet, F. Jollet, G. Jomard, S. Leroux, M. Mancini, S. Mazevet, M. J. T. Oliveira, G. Onidab, Y. Pouillon, T. Rangel, G.-M. Rignanese, D. Sangalli, R. Shaltaf, M. Torrent, M. J. Verstraete, G. Zerah, and J. W. Zwanziger, *Comput. Phys. Comm.*, **180**: 2582 (2009).
5. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.*, **77**: 3865 (1996).
6. <http://www.abinit.org/>
7. H. B. Schlegel, *J. Comput. Chem.*, **3**: 214 (1982).
8. A. A. Shklyev, F. N. Dultsev, K. P. Mogilnikov, A. V. Latyshev, and M. Ichikawa, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **44**: 025402 (2011).
9. I. V. Plyushchay, V. A. Makara, and O. I. Plyushchay, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **33**, Special Issue: 157 (2011) (in Ukrainian).
10. V. M. Tsmots, P. G. Litovchenko, Yu. V. Pavlovskyy, and M. M. Luchkevych, *Ukr. J. Phys.*, **54**, No. 10: 1007 (2009).
11. I. V. Plyushchay and V. A. Makara, *Dopovidi N.A.N.Ukr.*, No. 3: 110 (2009) (in Ukrainian).