

І. В. Плющай, член-кореспондент НАН України **В. А. Макара**,
О. І. Плющай

Магнітний стан крайової дислокації в кремнії

Електронні спектри та магнітний момент крайової дислокації в кристалічному кремнії розраховано методом функціоналу густини в узагальненому градієнтному наближенні. Обговорюються зміни густини електронних станів надкомірки, що містить дислокаційний диполь. Показано можливість формування феромагнітного впорядкування на обірваних зв'язках крайових дислокацій в кремнії. За нашими оцінками, магнітний момент розглянутої дислокаційної надкомірки становить $1,25\mu_B$.

Монокристалічний кремній є основою сучасної мікроелектроніки. Наявність в монокристалах кремнію дефектів, зокрема дислокацій, впливає на технологічно важливі властивості елементів електронних пристроїв [1, 2]. Тому вивчення як будови дислокацій, так і їх впливу на фізичні властивості кремнію є важливою науковою задачею, яка в міру розвитку розрахункових можливостей постійно привертає увагу дослідників [3–5].

Експериментально встановлено [6], що пластична деформація Si супроводжується зміною поведінки магнітної сприйнятливості: спостерігається зростання її питомої величини та з'являється нелінійно залежна від прикладеного магнітного поля складова. Ця “феромагнітна” складова магнітної сприйнятливості в цілому діамагнітного Si корелює з концентрацією неростових дислокацій, що утворюються при механічній обробці поверхні кремнію [7]. Можливість виникнення феромагнітного впорядкування на дислокаційних обірваних зв'язках проаналізовано в статті [8].

В експериментальних дослідженнях, зазначених вище, спеціальна увага приділялася контролю феромагнітних домішок, які б могли спричиняти таку “феромагнітну” поведінку магнітної сприйнятливості. Було доведено [6, 7], що саме дефекти та їх скупчення відповідають за зміну магнітної сприйнятливості деформованих (або оброблених) зразків у порівнянні зі зразками-свідками. Зокрема показано [6], що після відпалу при температурі вище $800\text{ }^\circ\text{C}$, в процесі якого відбувається перебудова ядра дислокації в Si, нелінійно залежна від поля “феромагнітна” складова магнітної сприйнятливості Si зникає. Останнє доводить, що саме дислокаційні обірвані зв'язки відповідають за “феромагнітну” поведінку магнітної сприйнятливості пластично деформованого Si.

У даному повідомленні представлено результати проведеного *ab initio* розрахунку електронних спектрів крайової дислокації в кремнії та проаналізовано можливість виникнення феромагнітного впорядкування на дислокаційних обірваних зв'язках.

Розрахунок проводився методом функціоналу густини [9] в узагальненому градієнтному наближенні [10] за допомогою пакета програм ABINIT [11]. Числовий відпал положень атомів проводився за алгоритмом, описаним у статті [12].

Добре відомо, що площиною легкого ковзання в Si є площина (111), відповідно нами було розглянуто крайову дислокацію, вектор Бюргерса якої лежить саме в цій площині. Для моделювання крайової дислокації обрано надкомірку з 192 атомів ($a_x = 4a(111)$, $a_y = 2a(1-10)$, $a_z = a(1/21/2-1)$, де a — період ґратки монокристалічного Si). Далі половина атомів із однієї з площин були видалені (12 атомів) так, що утворився диполь з двох крайових дислокацій, що можуть рухатися в площині ковзання (111). Періодичне

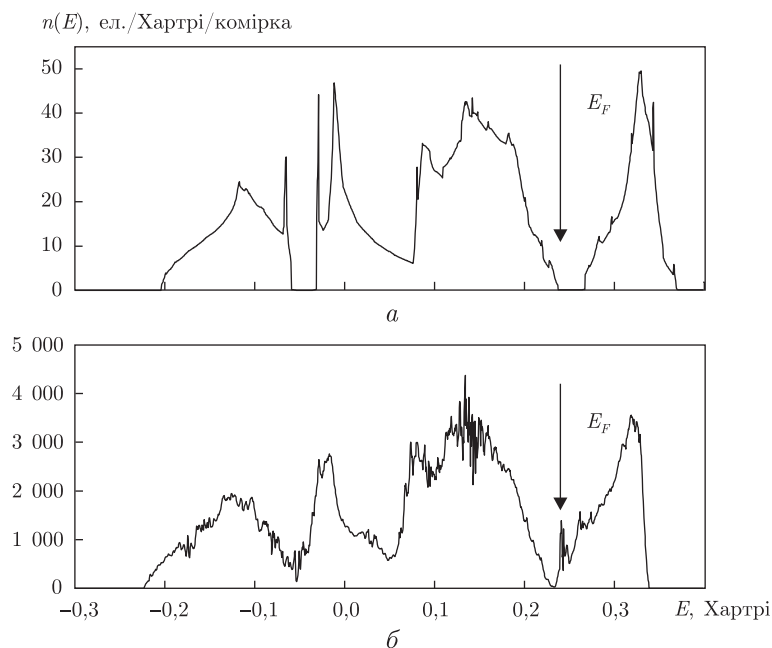


Рис. 1. Енергетична залежність густини електронних станів: *a* — кристалічного Si; *б* — надкомірки, що містить дислокаційний диполь. (Тут і на рис. 2–4 позначено рівень Фермі.)

повторення цієї надкомірки в просторі формує своєрідний “ліс” з паралельних дислокацій густиною $\sim 10^{13}$ см $^{-2}$. Зрозуміло, що це досить висока концентрація дислокацій, яка може реалізуватися лише поблизу границі гетеропереходу в епітаксійних гетероструктурах на основі Si [13] або бути модельним об’єктом для аналізу особливостей електронної структури поблизу ядра дислокації.

Нами проведено чисельний відпал “вихідної” дефектної надкомірки. На першому етапі відпалу атомні позиції змінювалися у відповідності з діючими на атоми силами, розрахованими з перших принципів. На другому етапі чисельного відпалу крім зміни атомних позицій була дозволена також зміна розмірів надкомірки вздовж вектора Бюргерса стосовно діючих напружень. Після релаксації атомних позицій надкомірки у відповідності з силами, розрахованими з перших принципів, нами отримано зайву енергію розглянутої крайової дислокації — 0,12 eV/ат.

Розраховану енергетичну залежність густини електронних станів дислокаційної надкомірки демонструє рис. 1, б. Основною відмінністю розрахованого електронного спектра надкомірки, що містить дислокаційний диполь у порівнянні зі спектром монокристалічного Si (див. *a* на рис. 1), є наявність гострого асиметричного піка в забороненій області під зоною провідності. Рівень Фермі потрапляє в область вказаного піка. Крім того, ширина забороненої зони дислокаційного Si помітно менша, ніж у монокристалі Si. Останнє ми пов’язуємо з наявністю поля напружень та утворення дислокаційних підзон над валентною зоною та безпосередньо під зоною провідності.

Для порівняння на рис. 2 представлена якісна схема електронних спектрів так званого дислокаційного Si, що формується поблизу гетеропереходів. Ця схема була відтворена в публікації [14] за результатами аналізу експериментальних даних по фотолюмінісценції, електролюмінісценції та вольт-амперних характеристик кремнієвих гетероструктур.

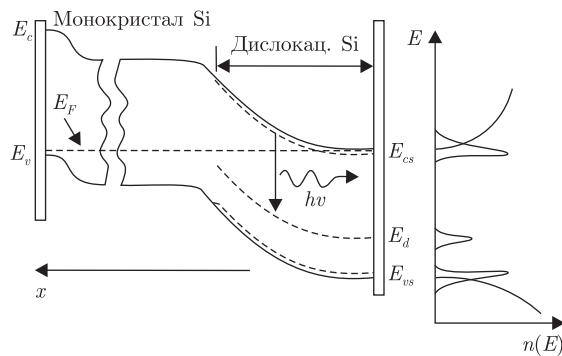


Рис. 2. Схематична діаграма зонної структури та густини електронних станів діода, що формується з кремнієвої підкладки та дислокаційного Si [14]

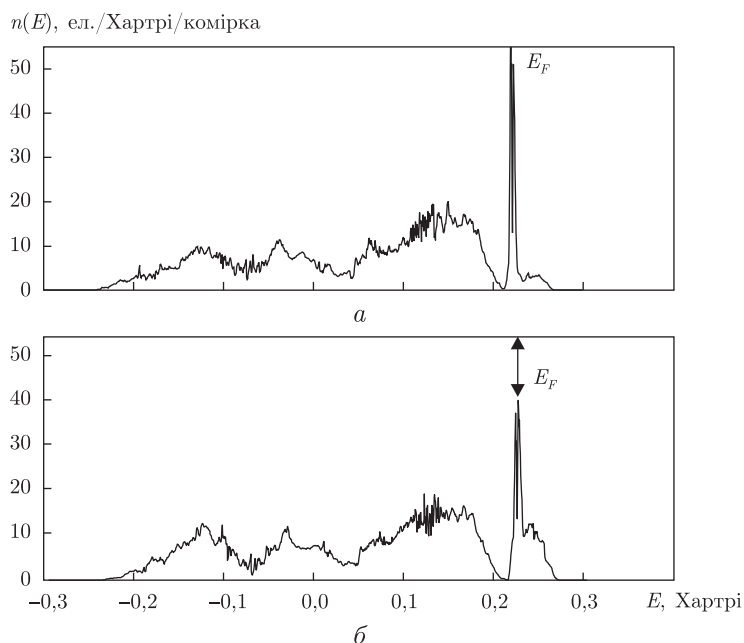


Рис. 3. Локальні електронні спектри атомів у ядрі дислокації: *a* — атом на лінії дислокації; *б* — атом, що є першим сусідом лінії дислокації з боку видаленої півплощини

З порівняння рис. 1 й 2 видно, що результати наших розрахунків якісно збігаються зі схемою зонної структури, відтвореною раніше [14] за результатами попередніх теоретичних оцінок та експериментальних досліджень гетеропереходу монокристалічний Si — дислокаційний Si. Рівень Фермі, який в монокристалічному Si потрапляє на верхню границю валентної зони, в дислокаційному Si лежить в околі досить гострої асиметричної підзони (так званої дислокаційної підзони), що формується безпосередньо під зоною провідності.

Аналіз локальних електронних спектрів рис. 3 дозволяє зв'язати цей субпік з обірваними зв'язками на атомах, розташованих на лінії дислокації (див. *a*) та їх першими сусідами з боку видаленої півплощини (див. *б*). Вказаний гострий пік не спостерігається в локальних спектрах усіх інших атомів розглянутої надкомірки. Отже, частково заповнений гострий пік, який спостерігається в електронному спектрі дислокаційного Si, пов'язаний з обірваними ненасиченими зв'язками, що формуються в ядрі дислокації.

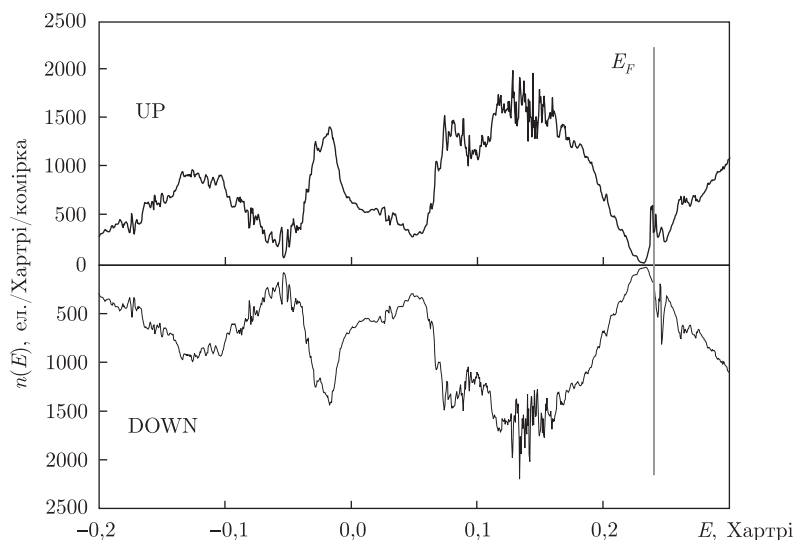


Рис. 4. Енергетична залежність густини електронних станів надкомірки Si, що містить дислокаційний диполь (у проекції на напрям спіну)

Як вже зазначалось, існують якісні теоретичні дослідження [8] та деякі експериментальні дані [6, 7], що свідчать про можливість встановлення феромагнітного впорядкування на дислокаційних обірваних зв'язках у кремнії. Проаналізуємо результати наших розрахунків з точки зору можливості виникнення зонного магнетизму. Згідно з критерієм Стонера, для виникнення магнітного впорядкування необхідна наявність вузького напівзаповненого піка поблизу рівня Фермі. Як раз таким і є дислокаційний субпік (див. б на рис. 1), пов'язаний з обірваними ненасиченими зв'язками в ядрі дислокації. Таким чином, наявність частково заповненого гострого піка (дислокаційної підзони) в електронному спектрі надкомірки, за критерієм Стонера, може призводити до виникнення магнітного впорядкування за зонною схемою.

Для перевірки цього припущення нами був проведений *ab initio* спін-поляризований розрахунок дислокаційної надкомірки. Розрахунок підтвердив, що основним буде дійсно спін-поляризований стан електронної підсистеми з виграшем по енергії 0,015 eV ($5,5 \cdot 10^{-4}$ Хартрі) на надкомірку.

Енергетичну залежність густини електронних станів дислокаційної надкомірки в проекції спіну (униз та вгору) ілюструє рис. 4. Видно, що спектри в цілому однакові за виключенням області вказаної дислокаційної підзони біля рівня Фермі. Електронні стани дислокаційної підзони, що відповідають напрямку спіну вгору частково заповнені, а підзона спіну униз повністю незаповнена. Отже, спостерігається некомпенсований магнітний момент на крайовій дислокації в кристалічному Si. Згідно з проведеним *ab initio* розрахунком, цей момент становить $1,25\mu_B$ на надкомірку, що містить дислокаційний диполь. Нагадаємо, що обрана нами надкомірка містить два відрізка лінії крайової дислокації (обірвана півплощина) по одному атому на кожному. Тобто отриманий сумарний магнітний момент ($1,25\mu_B$) та виграш по енергії за рахунок феромагнітного впорядкування дислокаційних обірваних зв'язків (0,015 eV) припадає на два атоми, що розташовані на лінії крайової дислокації в Si.

Таким чином відзначимо, що проведені *ab initio* розрахунки електронного стану крайових дислокацій в Si підтвердили можливість формування феромагнітного впорядкува-

ння на дислокаційних обірваних зв'язках, що узгоджується з експериментальними даними [6, 7].

1. Судзуки Т., Есинага Х., Такеуті С. Динамика дислокаций и пластичность. – Москва: Мир, 1989. – 296 с.
2. Kittler M. Dislocations in silicon as a tool to be used in optics, electronics and biology // Solid State Phen. – 2008. – **131–133**. – P. 289–292.
3. Kveder V., Sekiguchi T., Sumino K. Electronic states associated with dislocations in p-type silicon studied by means of electric-dipole-spin-resonance and deep-level-transient-spectroscopy // Phys. Rev. B. – 1995. – **51**. – P. 16721–16727.
4. Liu F., Mostoller M., Milman V. et al. Electronic and elastic properties of edge dislocations in Si // Ibid. – 1995. – **51**. – P. 17192–17195.
5. Lehto N. Shallow electron states of bounded intrinsic stacking faults in silicon // Ibid. – 1997. – **55**. – P. 15601–15607.
6. Цмоць В. М., Литовченко П. Г., Павловський Ю. В., Лучкевич М. М. Дослідження магнітної сприйнятливості пластично деформованих монокристалів кремнію та германію // Укр. фіз. журн. – 2009. – **54**, № 10. – С. 1009–1015.
7. Новиков М. М., Цмоць В. М., Ивасив З. Ф. и др. Детектирование неростовых дислокаций в монокристаллическом кремнии методом измерения магнитной восприимчивости // Там же. – 1996. – **41**, № 11./12. – С. 1127–1130.
8. Бойчук В. И., Цмоць В. М., Яншин Б. В. Влияние дислокаций на ферромагнитные свойства пластически деформированных кристаллов кремния // Там же. – 1988. – **33**, № 10. – С. 1515–1519.
9. Gonze X., Amadon B. et al. ABINIT: First-principles approach of materials and nanosystem properties // Comput. Phys. Com. – 2009. – **180**. – P. 2582–2615.
10. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple // Phys. Rev. Lett. – 1996. – **77**. – P. 3865–3868.
11. <http://www.abinit.org>.
12. Schlegel H. B. Optimization of equilibrium geometries and transition structures // J. Comput. Chem. – 1982. – **3**. – P. 214–218.
13. Bolkhovityanov Yu. B., Pchelyakov O. P. III–V Compounds-on-Si: heterostructure fabrication, application and prospects // Open Nanoscience J. – 2009. – **3**. – P. 20–33.
14. Shklyav A. A., Dultsev F. N., Mogilniko K. P. et al. Electroluminescence of dislocation-rich Si layers grown using oxidized Si surfaces // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2011. – **44**, No 2. – 025402, 7 p.

Київський національний університет
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 01.06.2012

И. В. Плющай, член-корреспондент НАН Украины **В. А. Макара**,
А. И. Плющай

Магнитное состояние краевой дислокации в кремнии

Электронные спектры и магнитный момент краевой дислокации в кристаллическом кремнии рассчитаны методом функционала плотности в обобщенном градиентном приближении. Обсуждаются изменения плотности электронных состояний сверхячейки, которая содержит дислокационный диполь. Показана возможность формирования ферромагнитного упорядочения на оборванных связях краевых дислокаций в кремнии. По нашим оценкам, магнитный момент рассмотренной дислокационной сверхячейки составляет 1,25 μ_B .

I. V. Plyushchay, Corresponding Member of the NAS of Ukraine **V. A. Makara**,
A. I. Plyushchay

Magnetic state of an edge dislocation in silicon

The electronic spectra and the magnetic moment of an edge dislocation in crystalline Si are calculated by the density functional theory in the general gradient approximation. Changes in the density of electronic states of a supercell with dislocation dipole are discussed. We have demonstrated the possibility of formation of the ferromagnetic ordering on the dangling bonds of edge dislocations in silicon. By our estimation, the magnetic moment of the examined dislocation supercell is $1.25\mu_B$.