

## РАСЧЕТ g-ФАКТОРА ПАРАМАГНИТНЫХ ДЕФЕКТОВ В АЛМАЗЕ, КРЕМНИИ И КАРБИДЕ КРЕМНИЯ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Институт физики полупроводников НАН Украины им. В.Е. Лашкарева,  
пр. Науки 45, 03028 Киев, Украина  
Кыргызский Национальный Университет им. Ж.Баласагына, ул. Т.Абдымомунова 328,  
Бишкек 720033, Кыргызская Республика

### Введение.

В течение последних сорока лет метод ЭПР является ключевым при изучении точечных дефектов в полупроводниках. Информация об электронной структуре таких дефектов содержится в параметрах спинового гамильтониана, которые определяются из угловых зависимостей экспериментальных спектров. Для установления связи параметров спинового гамильтониана с геометрией дефекта и его электронной структурой в последние годы используют расчеты “из первых принципов”, базирующиеся на методе функционала плотности.

Электронный g-тензор является одним из важнейших параметров в спектроскопии ЭПР. В частности, точечную симметрию дефекта обычно определяют из угловых зависимостей g-тензора. Однако, в отличие от параметров сверхтонкого взаимодействия, для расчета g-тензора “из первых принципов” требуется вычисление матричных элементов спин-орбитального оператора, что приводит к необходимости использования больших вычислительных мощностей. До настоящего времени такие расчеты проводились только для сравнительно небольших молекул.

В течение последних пяти лет для оператора спин-орбитального взаимодействия были предложены эффективные приближения, позволяющие достаточно точно рассчитывать g-тензор молекулярных объектов при умеренных затратах машинного времени.

Целью настоящей работы является апробирование таких приближений для точечных дефектов в алмазе, кремнии и карбиде кремния.

### Методика расчетов.

1. Спин-орбитальный оператор в уравнении Брейта-Паули являющийся суммой одноэлектронного и двухэлектронного операторов

$$H_{SOC} = H_{SOC}^{(1)} + H_{SOC}^{(2)}$$

представляется в виде эффективного одноэлектронного оператора

$$H_{SOMF} = \sum_i \epsilon_i \epsilon_i$$

который, однако, включает в неявном виде двухэлектронные эффекты (Frank Neese, Journ. Chem. Phys., v.122, 2005).

2. g-тензор рассчитывался как вторая производная энергии (coupled-perturbed SCF equations)
3. Использовался метод функционала плотности (градиентно скорректированный функционал BLYP и гибридный функционал B1LYP).
4. Использовался достаточно гибкий валентно-расщепленный и включающий поляризующие d-орбитали базис гауссовых функций 6-311G(d).

- Дефекты в полупроводниках моделировались с использованием 71-атомных и 163-атомных тетраэдрических кластеров (см. Рис.1). При этом оборванные связи на поверхности кластера насыщались водородом.
- Расчеты производились с помощью квантовохимической программы ORCA (автор – проф. Frank Neese, Боннский университет, Германия).

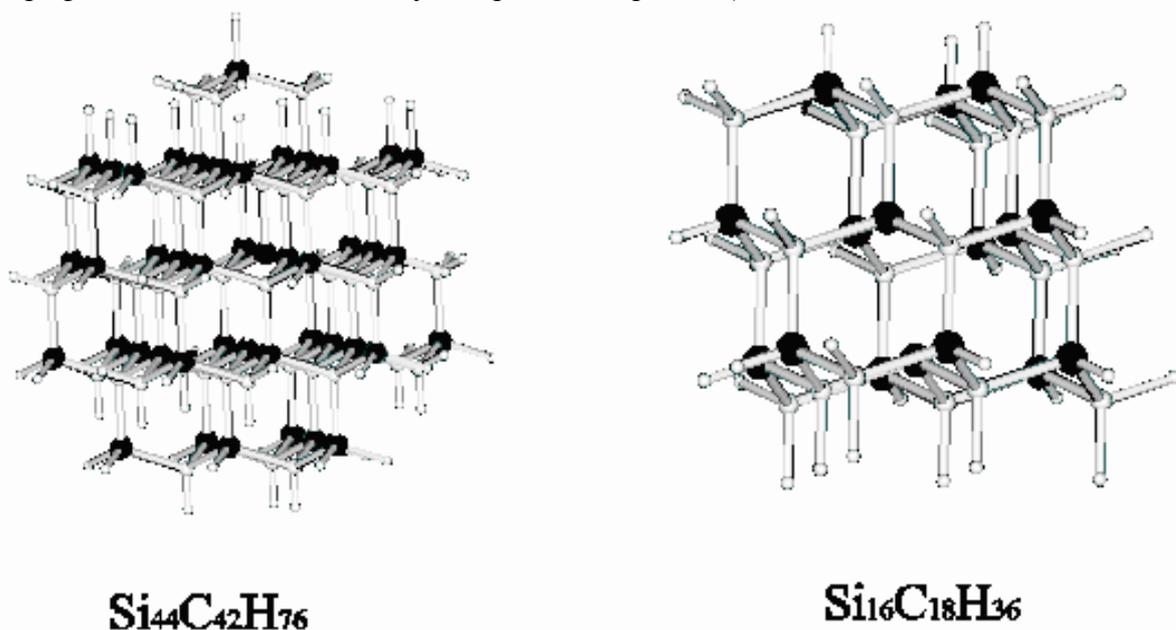


Рис.1. Кубические кластеры карбида кремния, используемые для расчета g-факторов дефектов

#### Объекты исследования.

В качестве объектов для апробации методики расчета были выбраны хорошо изученные дефекты в тетраэдрических полупроводниках IV группы:

- Примесь азота в алмазе ( $N_C^0$ )
- Положительно заряженная вакансии углерода в SiC ( $V_C^+$ )
- Отрицательно заряженная вакансии кремния в SiC ( $V_{Si}^-$ )
- Положительно заряженный межузельный углерод в SiC ( $C_i^+$ )
- Отрицательно заряженный межузельный углерод в SiC ( $C_i^-$ )
- Примесь бора, замещающего кремний в SiC ( $B_{Si}^0$ )
- Положительно заряженная вакансия в кремнии ( $V^+$ )
- Комплекс фосфор – вакансия (E-центр) в кремнии (P-V).

#### Сравнение расчетных и экспериментальных g-тензоров.

| Defect                            | Cluster   | g-tensor       |                |
|-----------------------------------|-----------|----------------|----------------|
|                                   |           | Calculated     | experiment     |
| Diamond<br>( $N_C$ ) <sup>0</sup> | 71-atoms  | $g_1 = 2.0022$ | $g_1 = 2.0022$ |
|                                   |           | $g_2 = 2.0024$ | $g_2 = 2.0022$ |
|                                   |           | $g_3 = 2.0024$ | $g_3 = 2.0022$ |
| SiC<br>$V_C^+$                    | 162-atoms | $g_1 = 2.0037$ | $g_1 = 2.0026$ |
|                                   |           | $g_2 = 2.0037$ | $g_2 = 2.0026$ |
|                                   |           | $g_3 = 2.0068$ | $g_3 = 2.0060$ |
| SiC,<br>$V_{Si}^-$                | 162-atoms | $g_1 = 2.0028$ | $g_1 = 2.0029$ |
|                                   |           | $g_2 = 2.0028$ | $g_2 = 2.0029$ |
|                                   |           | $g_3 = 2.0028$ | $g_3 = 2.0029$ |

|  |           |  |  |
|--|-----------|--|--|
| SiC,<br>$V_{Si}^-$                     | 70-atoms  | $g_1 = 2.0027$<br>$g_2 = 2.0027$<br>$g_3 = 2.0027$ | $g_1 = 2.0029$<br>$g_2 = 2.0029$<br>$g_3 = 2.0029$ |
| Defect                                 | Cluster   | g-tensor   |  |
|  |           | Calculated   | Experiment   |
| SiC<br>$C_i^+$                         | 72-atoms  | $g_1 = 1.9945$<br>$g_2 = 2.0014$<br>$g_3 = 2.0022$ | $g_1 = 1.9951$<br>$g_2 = 2.0007$<br>$g_3 = 2.0020$ |
| SiC,<br>$C_i^-$                        | 72-atoms  | $g_1 = 2.0015$<br>$g_2 = 2.0027$<br>$g_3 = 2.0041$ | $g_1 = 1.9951$<br>$g_2 = 2.0007$<br>$g_3 = 2.0020$ |
| Silicon<br>$V^+$                       | 70-atoms  | $g_1 = 1.9915$<br>$g_2 = 1.9915$<br>$g_3 = 2.0067$ | $g_1 = 1.9989$<br>$g_2 = 1.9989$<br>$g_3 = 2.0087$ |
| Silicon<br>(P-V)                       | 70-atoms  | $g_1 = 2.0014$<br>$g_2 = 2.0053$<br>$g_3 = 2.0068$ | $g_1 = 2.0005$<br>$g_2 = 2.0096$<br>$g_3 = 2.0112$ |
| SiC<br>(B <sub>Si</sub> ) <sup>0</sup> | 163-atoms | $g_1 = 2.0025$<br>$g_2 = 2.0070$<br>$g_3 = 2.0070$ | $g_1 = 2.0022$<br>$g_2 = 2.0059$<br>$g_3 = 2.0059$ |

**Выводы:**

1. Используемые приближения позволяют вычислять компоненты g-тензора с точностью, достаточной для идентификации дефектов в тех случаях, когда спиновая плотность локализована в основном на более легких атомах (углерод).
2. В случае межзельного углерода в SiC расчет позволяет идентифицировать зарядовое состояние дефекта как положительное (расчет констант сверхтонкого взаимодействия в этом случае дает практически одинаковые значения для обоих состояний).
3. Затраты машинного времени и оперативной памяти при таких расчетах весьма умеренные и позволяют использование персональных компьютеров.