**Энергетические состояния в запрещенной зоне кристаллического кремния, обусловленные атомами замещения титана и углерода**

***Г.В. Арзуманян 1), А.Б. Колпачёв 2)***

1), 2) Технологический институт Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования
«Южный федеральный университет» в г. Таганроге, Россия

В связи с тем, что кремний остаётся основным материалом в электронике, исследования структуры и механизмов образования дефектных комплексов различной природы в кремнии, а так же изучение локальных изменений электронного энергетического строения (ЭЭС) кремния содержащего такие комплексы, весьма актуальны.

В настоящем докладе представлены результаты расчетов «из первых принципов» локальных изменений ЭЭС кремния, содержащего дефектный комплекс состоящий из атома замещения титана и атома замещения углерода (TIС– центр). Расчёты проводились в рамках теории многократного рассеяния с использованием приближения локального функционала электронной плотности (DFT) и muffin-tin приближения. Учитывалось, что атомы кремния в TIС– центре не эквивалентны вследствие различия атомарного состава их ближайшего окружения. Рассеивающие центры, соответствующие таким атомам в дальнейшем именуются Si(k) (k = 0, 1, …, 6). Различия, связанные с влиянием ближайшего окружения, учитывались как на этапе вычисления плотности заряда, так и при решении задачи многократного рассеяния.

Для расчета локальных парциальных плотностей электронных состояний (ПЭС) каждого из атомов Si(k), кислорода и титана, формировался кластер их 87 атомов-рассеивателей, с центром на рассматриваемом атоме. У атомов Si(k) и углерода учитывались электронные состояния s- и p- симметрии, а у атома титана – s-, p- и d- симметрии. Полученные ПЭС сравнивались с полной ПЭС атомов типа Si(0), атомов кремния удаленных на расстоянии 2,5*а* (*а* = 543 пм, постоянная решетки кремния) от дефектного центра, локальная ПЭС на которых не отличается от ПЭС кремния в идеальном кристалле.

Было рассмотрено два типа TIC- центров. В SITIC1 – центре атомами Si(1) (3 атома) считались атомы кремния, удаленные на расстояние 0,43*а* от Ti и 0,71*а* от C; Si(2) (3 атома) – 0,71*а* от Ti и 1,1*а* от C; Si(3) (6 атомов) – 0,71*а* от Ti и 0,83*а* от C; Si(4) (3 атома) – 0,71*а* от Ti и 0,43*а* от C; Si(5) (6 атома) – 0,83*а* от Ti и 0,71*а* от C; Si(6) (3 атома) – 1,1*а* от Ti и 0,71*а* от C.

Выполненные расчеты показали, что с SITIC1-центром могут быть связаны несколько локальных уровней в запрещённой зоне кремния. Уровень (Ev + 0,735) эВ является наиболее заметным и обусловлен d-состояниями титана. Такое же энергетическое положение имеет максимум ПЭС p− состояний углерода, но величина её незначительна. У всех атомов Si(k) в запрещённой зоне также появляются локальные энергетические уровни. Однако только у атомов Si(2) (уровень (Ev + 0,597) эВ), Si(3) (уровень (Ev + 0,845) эВ)и Si(4) (уровень
(Ev+ 0,872) эВ) величина суммарной ПЭС соответствующих уровней во всём дефектном комплексе сравнима с величиной ПЭС уровня (Ev + 0,735) эВ d-состояний титана.

TIС2– центр представлял собой локальную область кремния, у которого в кристаллографической позиции (0.0; 0.0; 0.0) расположен атом замещения титана, а в
(0.5; 0.5; 0.0) атом замещения углерода. Расчеты показали, что наличие такого дефекта не приводит кзначительным изменениям ЭЭС запрещенной зоны атомов кремния Si(k), а ПЭС атомов титана и углерода не имеют локальных максимумов в запрещенной зоне кремния Si(0).