

РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ СИСТЕМ С ВЫСОКОЙ СТЕПЕНЬЮ СИММЕТРИИ НА ПРИМЕРЕ КЛАСТЕРА Si_{12}

Канд. физ.-мат. наук БИБИК А. И.

Белорусский национальный технический университет

Интенсивное развитие микро- и нанoeлектроники в последние десятилетия вызывает повышенный интерес к кремниевым микро-структурам, таким как пористый кремний и кремниевые нанокристаллы, свойства которых хорошо описаны в [1, 2].

Мы покажем, что люминесценция пористого кремния в красном диапазоне видимого спектра может быть объяснена моделью пористого кремния как конгломерата нанокристаллов кремния и одновременно предложим упрощенный метод расчета систем с высокой степенью симметрии.

Определим спектр внешних валентных электронов кластеров кремния на примере кластера Si_{12} как яркого представителя систем с высокой степенью симметрии. Согласно [3] данный объект представляет собой икосаэдр с диаметром приблизительно 0,5 нм. Валентные электроны данного кластера обобществляются для всех 12 атомов и образуют электронный газ, распределенный с некоторой плотностью в слое между икосаэдрами диаметрами 0,634 и 0,366 нм (рис. 1). Толщину слоя принимаем равной диаметру изолированного атома кремния.

В вычислениях будем использовать X_α -метод, хорошо описанный Дж. Слэтером [4]. В этом случае уравнение Шредингера для одноэлектронного приближения в атомной системе единиц запишется следующим образом:

$$[-\nabla^2 + V_c(r) + V_{X\alpha}(r)]\psi_k(r) = 2\varepsilon_k\psi_k(r), \quad (1)$$

где ε_k – собственные значения энергии в ридбергах; $V_c(r)$ – кулоновский потенциал в произвольной точке r ; $V_{X\alpha}(r)$ – потенциал электронного обменного взаимодействия, определяемый выражением

$$V_{X\alpha}(r) = -6\alpha^3 \sqrt{\frac{3r\rho}{4\pi}}, \quad (2)$$

где α – параметр, определенный для каждого элемента из условия равенства полной энергии в методе X_α Хартри–Фока; ρ – электронная плотность,

$$\rho(r) = \sum_k n_k \psi_k^*(r) \psi_k(r), \quad (3)$$

где n_k – число электронов в состоянии ψ_k .

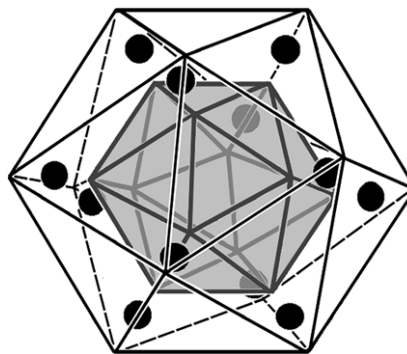
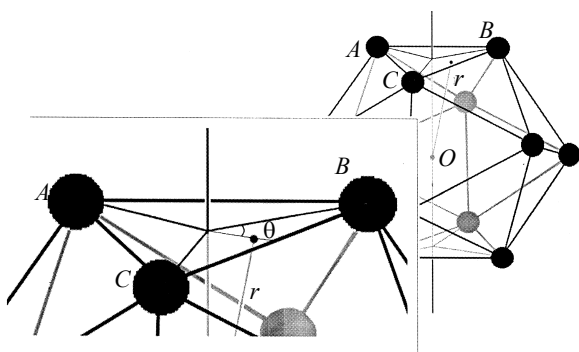


Рис. 1. Область электронной плотности кластера Si_{12}

При расчетах предполагается, что потенциал $V_c(r) + V_{X\alpha}(r)$ является постоянным в пределах толщины слоя электронной плотности, так как такое приближение позволит в дальнейшем рассматривать волновую функцию электрона, зависящую только от двух сферических координат. Оценка погрешности такого приближения дает значение в пределах 5 % от величины потенциала.

Итак, рассмотрим произвольную точку, принадлежащую произвольной грани икосаэдра Si_{12} . Данная грань будет представлять собой равносторонний треугольник ABC , в вершинах которого находятся атомы кремния (рис. 2).

Рис. 2. Геометрическая структура кластера Si_{12}

Потенциал в данной точке определится в сферической системе координат как функция расстояния r от центра симметрии икосаэдра (точка O) и угла θ . В явном виде в произвольной точке r_1 он будет выглядеть следующим образом:

$$V(r_1) = V_c(r_1) + V_{X\alpha}(r_1) = -\sum_{k=1}^{12} \frac{2Z}{r_{1k}} + 2 \int \frac{\rho(r_2)}{r_{12}} dr_2 - 6\alpha \sqrt{\frac{3r\rho}{4\pi}}, \quad (4)$$

где параметр $Z = 4$ – заряд каждого из 12 ионов, электронная плотность ρ определяется выражением (3) и в первом приближении выглядит как $(r - r_{\min})(1 - \cos 3\theta)$; α является табличной константой, для кремния равной 0,72751. Так как уравнение (1) с учетом потенциала (4) не имеет аналитического решения, заменим истинный потенциал (4) следующим псевдопотенциалом:

$$V_p(r) = -3,5 + \frac{16,9}{r} + \frac{6}{r^2} - \left(10,6 - \frac{39,8}{r}\right) \cos 3\theta, \quad (5)$$

определяемым условием максимального согласования с формой потенциала (4) в области электронной плотности (рис. 3а).

С точностью до совпадения $\cos 3\theta$ и $\cos 6\theta$ в одном из слагаемых произведения $V_p(r)\Psi_k$ (рис. 3б) решения получающегося уравнения представляют собой следующие волновые функции:

$$\Psi_k = C_0 \left(r^2 + \sum_{k=1}^n C_k r^k \right) e^{-akr} (b + \cos 3\theta). \quad (6)$$

Константы a_k , b , C_k в уравнении (6) могут быть найдены из условия равенства значений волновой функции в симметричных точках относительно переменных r и θ и условия $C_n = 0$, выполнение которого необходимо, чтобы удо-

влетворялось условие $\Psi_k(\infty) = 0$. Константа C_0 находится из условия нормировки волновой функции.

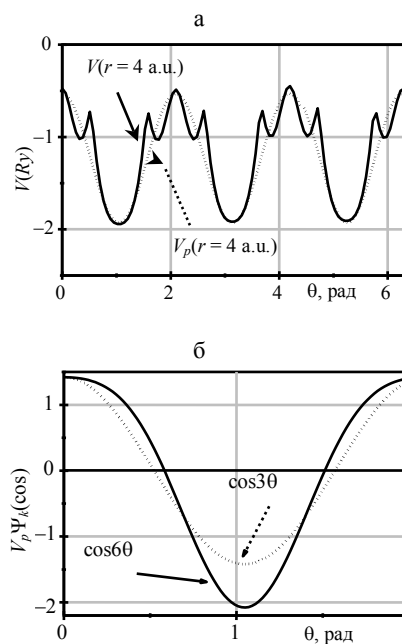


Рис. 3. Иллюстрация погрешностей при выборе псевдопотенциала и решения уравнения Шредингера

В результате с учетом упомянутых выше условий мы получаем собственные значения энергии для основного состояния валентных электронов $\varepsilon_0 = 24,2$ эВ и первого возбужденного состояния $\varepsilon_1 = 22,6$ эВ, относящиеся к Ψ_0 и Ψ_1 .

ВЫВОД

Таким образом энергия перехода в первое возбужденное состояние составляет порядка 1,6 эВ, что соответствует красному спектральному диапазону и хорошо согласуется с данными [1–3].

ЛИТЕРАТУРА

1. **Woggon, U.** Excitons in Quantum Dots (Review Article) / U. Woggon, S. V. Gaponenko // *Phys. Stat. Sol. (b)*. – 1995. – Vol. 189. – 59 p.
2. **Brus, L. E.** The Luminescence of Silicon Materials: Chains, Sheets, Nanocrystals, Nanowires, Microcrystals, and Porous Silicon / L. E. Brus // *J. Phys. Chem.* – 1994. – № 98. – 7 p.
3. **Bahel, A.** Structure of the Si_{12} cluster / A. Bahel, M. V. Ramakrishna // *Phys. Rev. B* 51. – 1995. – № 19. – 3 p.
4. **Slater, J. C.** The self-consistent field for molecules and solids / J. C. Slater. – Ed. by McGraw-Hill, New York, 1974. – 640 p.

Поступила 20.05.2011