

Состояния кремниевых нано-кластеров, содержащих примеси углерода

© М.Ю. Ташметов¹, Ш.М. Махкамов¹, Ф.Т. Умарова¹, А.Б. Нормуродов¹,
Н.Т. Сулайманов^{1,¶}, А.В. Хугаев¹, Х.М. Холмедов²

¹ Институт ядерной физики Академии наук Республики Узбекистан,
100214 Ташкент, Узбекистан

² Ташкентский университет информационных технологий им. аль-Хорезми,
100084 Ташкент, Узбекистан

¶ E-mail: sulaymon@inp.uz

Поступила в Редакцию 1 марта 2022 г.

В окончательной редакции 1 июня 2022 г.

Принята к публикации 6 марта 2023 г.

Методом нетрадиционной сильной связи в комбинации с методом молекулярной динамики определены структурные и электронные состояния дефектных комплексов в кластере Si_{29} с участием атомов углерода и водорода. Показано, что в кремниевых кластерах атомы углерода образуют мостиковую связь с двумя атомами кремния и находятся в гексагональном положении в центре ячейки, формируя дефект типа $\text{Si}_{29}:\text{C}_i$. Введение водорода в кремниевый кластер приводит к образованию дефектного комплекса $\text{C}_i\text{-H-Si}$ и понижению энергии связи дефекта $\text{Si}_{29}:\text{C}_i$. На основе проведенных расчетов выявлено, что углерод дает мелкие уровни в запрещенной зоне нанокремния, а дефектный комплекс углерод-водород в гидрогенизированном кластере, в зависимости от зарядового состояния дефектного комплекса, проявляет как глубокие, так и мелкие уровни.

Ключевые слова: МД и НМСС методы, кремниевые нанокластеры, гидрогенизированный кластер, структурные дефекты, *ab initio* методы, атомы углерода и водорода, пространственная структура, мелкий и глубокий уровни.

DOI: 10.21883/FTP.2023.02.55330.3335

1. Введение

В последние годы в связи необходимостью поиска новых материалов для нанoeлектроники активно развиваются исследования по управлению свойствами полупроводников, основанные на формировании в их матрице низкоразмерных кластеров. Нанокластеры могут стать основой таких материалов благодаря своим уникальным свойствам, таким как сильная зависимость их электронной структуры от размера, состава и геометрических параметров, что позволяет моделировать необходимые характеристики приборов.

В состав кластера могут входить атомы вводимых и сопутствующих примесей, атомы собственных компонентов, а также собственные точечные дефекты кристаллической решетки. Если учесть, что монокристаллический кремний является базовым материалом современной полупроводниковой электроники, содержащей в матрице сопутствующие примеси, такие как кислород, углерод и водород, имеющие склонность к формированию различных низкоразмерных структурных дефектных комплексов, тогда эти примеси могут существенно влиять на структуру кремниевых кластеров, изменяя их свойства и электронные состояния. Изменение состояния кластеров можно прогнозировать путем моделирования структуры кремниевых нанокластеров [1]. Имеющиеся работы по моделированию в основном посвящены изучению структуры кластеров,

сформированных с участием собственных атомов без учета примесных дефектов с использованием различных методов. Проведение оптимизации геометрии и модельного расчета электронной структуры кремниевых кластеров, с участием сопутствующих примесей, требует комплексного подхода и комбинации полуэмпирического, неэмпирического и других вычислительных подходов. Цель данной работы заключается в применении комбинации нетрадиционного метода сильной связи с методом молекулярной динамики для расчета структуры и электронных состояний кремниевых кластеров, содержащих атомы углерода с различными зарядами и выявление роли внедренных атомов водорода на характеристики кластера, включающего 29 атомов кремния.

2. Методика расчетов

Объектами исследования нами были выбраны кремниевые наноразмерные димеризованные и недимеризованные гидрогенизированные (оборванные поверхностные связи нейтрализованы атомами водорода) кластеры типа $\text{Si}_{29}:\text{C}$, $\text{Si}_{29}\text{H}_{24}:\text{C}$, $\text{Si}_{29}\text{H}_{36}:\text{C}$.

Первоначально рассмотрим формирование дефектов в монокристаллическом кремнии с участием углерода и водорода. Углерод является неконтролируемой примесью в Si, его содержание в матрице Si может

доходить до $2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Считалось, что его присутствие в расплаве может влиять только на структурное совершенство выращенных монокристаллов и является электрически нейтральной примесью. Однако в последнее время установлено, что углерод, взаимодействуя с сопутствующими примесями, особенно с кислородом, может влиять и на электрофизические свойства материала, подавляя формирование кислородных термодиффузионных комплексов типа CO_n . В работах [2,3] из исследований ЭПР были получены основные сведения о состоянии примеси углерода в кремнии. Выявлены три типа образующих пар электрически активных состояний углерода: положительно заряженное межузельное состояние C_i^+ ; нейтральное состояние C_i^0 , термически распадающееся при 65°C , и стабильная до 250°C , более устойчивая пара C_S-C_i . Большая вероятность нахождения углерода в межузельном положении была подтверждена и авторами работ [4,5]. Присутствие как кислорода, так и углерода в кремнии при термообработке может стимулировать образование ассоциатов в результате выделения примесей из их пересыщенных твердых растворов с последующим формированием различных микродефектов до концентраций $\sim 10^8-10^9 \text{ см}^{-3}$ с размерами $\sim 60-80 \text{ нм}$ [6]. Эти микродефекты могут быть уменьшены до минимума путем обработки кристалла в атмосфере аргона с добавлением водорода. Обработка в атмосфере чистого водорода ведет к образованию микродефектов нового типа, представляющих собой выделение водорода и приводящих к ухудшению механической прочности и стойкости кремния к окислению. По литературным данным, атомы водорода располагаются в межузельных позициях алмазоподобных полупроводников, образуя комплексные дефекты, энергетический спектр которых носит характер, присущий водородоподобным примесям, но отличающийся симметрией примесного центра от обычных водородоподобных примесей замещения [7]. Энергия связи атомов водорода с атомами кремния составляет $\sim 2.0 \text{ эВ}$. Такая большая энергия ионизации не позволяет проявлять атомарному водороду электрическую активность. Известно, что насыщение водородом поверхности кремния из-за соединения оборванных химических связей атомов кремния стабилизирует ее свойства. Однако сведения о поведении водорода в кремниевых кластерах, в зависимости от содержания примеси углерода, практически отсутствуют. Структуру сформированных кластеров, с участием углерода и водорода, можно рассчитать методом моделирования кластеров. Как будет показано далее, использование комбинированных методов для исследования электронной структуры кремниевых кластеров позволит на основе теоретических расчетов моделировать оптимизированную геометрическую структуру кластеров кремния с учетом примеси углерода и введенных атомов водорода.

Расчеты структуры кластеров проводились комбинацией методов молекулярной динамики (МД) с нетради-

ционным методом сильной связи (НМСС) [8,9], в котором учитываются физические и химические свойства межатомных связей как между атомами матрицы, так и между атомами матрицы и примесными атомами, в том числе и все составляющие полной внутренней энергии связи кристаллической решетки. Процедура параметризации в данном случае позволяет рассчитывать структурные параметры как бездефектной решетки, так и кристалла с точечными дефектами. Равновесная геометрия кластеров была оптимизирована с помощью метода МД. Мы используем НМСС с полным функциональным выражением энергии, которое отличается по форме от обычно используемых энергетических функционалов метода сильной связи (МСС). Выражение для функционала полной энергии НМСС можно описать в следующем виде [8]:

$$E_{tot} = \sum_{\mu} \sum_{v>\mu} \frac{Z_{\mu}^{scr}(R_{\mu v}) Z_{v}^{scr}(R_{\mu v})}{R_{\mu v}} + \sum_{\mu} \sum_{v>\mu} \frac{Q_{\mu}(R_{\mu v}) Q_{v}(R_{\mu v})}{R_{\mu v}} + \sum_{\mu} \sum_{v>\mu} \sum_i \sum_j P_{\mu i, v j} H_{\mu i, v j} + \sum_{\mu} (E_{\mu} - E_{\mu}^0), \quad (1)$$

где $R_{\mu v}$ — расстояние между ядрами, экранированный заряд ядра атома

$$Z_{\mu}^{scr} = Z_{\mu}^{scr}(R_{\mu v}, \{N_{\mu i}^0\}) = Z_{\mu} - \sum_i N_{\mu i}^0 [1 - a_{\mu i} \exp(-\alpha_{\mu i} R_{\mu v} / R_{\mu i}^0)], \quad (2)$$

и неточечный ионный заряд

$$Q_{\mu} = Z_{\mu}^{scr}(R_{\mu v}, \{N_{\mu i}^0\}) - Z_{\mu}^{scr}(R_{\mu v}, \{N_{\mu i}\}), \quad (3)$$

Z_{μ} — заряд μ -го ядра (или ядра вместе с остовными электронами); $R_{\mu i}^0 = n / \xi_{\mu i}^0$ — наиболее вероятное расстояние между электроном и ядром, n и $\xi_{\mu i}^0$ — главное квантовое число и слейтеровские экспоненты i -й атомной орбитали (АО), центрированной на μ -м ядре; E_{μ}^0 и E_{μ} — полные энергии индивидуальных атомов в не взаимодействующей и взаимодействующей системах, характеризующихся числами заполнения $\{N_{\mu i}^0 \equiv P_{\mu i, \mu i}^0\}$ и $\{N_{\mu i} \equiv P_{\mu i, \mu i}\}$ (здесь $P_{\mu i, \mu i}^0$ и $P_{\mu i, \mu i}$ — функция, характеризующая меру „точности“ электронного облака вокруг ядра), и энергиями $\{E_{\mu i}^0\}$ и $\{E_{\mu i}\}$ валентных АО соответственно; α и a — подгоночные параметры. Здесь и далее всегда подразумеваются атомные единицы величин.

Первый член в (1) представляет собой отталкивание экранированных ядерных зарядов нейтральных атомов в основном состоянии. Второй член в уравнении (1) может быть отличным от нуля даже для нейтрального атома.

Для нейтральной двухатомной молекулы АО предполагаются ортогональными и матричное уравнение вида

$$\sum_{vi} (H_{\mu i, v j} - \epsilon \delta_{\mu i, v j}) C_{v j} = 0 \quad (4)$$

решается самосогласованно для определения энергетического спектра $\{\epsilon_k\}$ и коэффициентов разложения $C_{v j}$ молекулярных орбиталей (МО) системы по АО, где $\delta_{\mu i, v j}$ — потенциал возмущения при взаимодействии μ -атомной орбитали i -атома с v -атомной орбиталью j -атома.

В параметризации НМСС параметры малых кластеров, полученные в рамках *ab initio* расчетов [10], являются основными реперными системами. Точность метода расчета обеспечивается корректной процедурой параметризации геометрических и энергетических характеристик и спектроскопических энергий малых систем с использованием выражения для полной энергии (1), составляющие которой определяются через индивидуальные характеристики (энергии и слейтеровские экспоненты АО) химических элементов.

Оптимизация пространственной структуры кластеров проводилась методом молекулярной динамики. Метод молекулярной динамики [11] является методом, основанным на классической механике, а именно на численном интегрировании уравнений движения Ньютона [9]:

$$m_i d^2 \vec{r}_i / dt^2 = m_i \vec{a}_i = \vec{F}_i; \quad \vec{F}_i = dU / d\vec{r}_i, \quad (5)$$

где m_i , \vec{r}_i и \vec{a}_i — соответственно масса, положение и ускорение i -й частицы; \vec{F}_i — сила, действующая на i -ю частицу со стороны других частиц; U — полная потенциальная энергия системы, которая может быть рассчитана одним из приближенных методов.

При сравнительном анализе энергетических характеристик следует учесть, что семейство полуэмпирических методов сильной связи недоучитывает, а *ab initio* методы, основанные на теории функционала плотности, переучитывают в расчетах полную внутреннюю энергию. Следующим шагом в приближении к идеальному состоянию взаимодействующей системы многих заряженных частиц является одноэлектронное приближение, т.е. приведение многоэлектронной задачи к одноэлектронной. В результате таких упрощений расчетов, при сохранении точности структурных параметров системы и достаточно хорошего соответствия энергетических характеристик, происходит системная недооценка значений полной внутренней энергии [12]. В методах расчетов параметров и характеристик системы взаимодействующих атомов из первых принципов, для устранения нефизических отклонений рассчитываемых значений величин также прибегают к одноэлектронному приближению, но здесь не используется отсечение двукратного учета взаимодействия электронов, участвующих в образовании связей. Вследствие этого значение полной внутренней энергии переоценивается [9]. Но в обоих вариантах,

при моделировании, структурные параметры рассчитываются с одинаковой точностью. Поэтому вполне справедливо использование полуэмпирического подхода в компьютерном моделировании структуры и некоторых основных энергетических параметров кластеров, полученные результаты которых сравнимы с результатами расчетов в рамках *ab initio* методов, например с результатами работы [10]. С другой стороны, сложности процедур параметризации и известная ограниченность применения полуэмпирических методов сильной связи, а также необходимость сравнительного анализа с широко распространенными *ab initio* методами побудили нас обратиться к возможностям пакета программ ORCA для оптимизации структурных и энергетических параметров наноразмерных кластеров кремния. Дальнейшие исследования проводятся с применением собственно *ab initio* методов.

3. Результаты и обсуждение

3.1. Дефектные центры углерода в кластерах кремния

Изначально для моделирования структур рассчитаны межузельные атомы углерода в различных положениях чистого поверхностно-димеризованного кластера $\text{Si}_{29}:\text{C}_i$ и гидrogenизированного кластеров $\text{Si}_{29}\text{H}_{24}:\text{C}_i$ и $\text{Si}_{29}\text{H}_{36}:\text{C}_i$ в положительном и отрицательном зарядовых состояниях углерода (рис. 1).

Из приведенных пространственных структур видно, что атом углерода образует мостиковую связь с двумя атомами кремния, располагаясь в межузельной позиции (далее обозначим этот атом как C_i , а примесный атом углерода, который занимает узел в кристаллической решетке кремния — C_s). В моделируемых структурах атом углерода позиционируется или в гексагональном положении в центре ячейки, или как примесь замещения на центральном T_d узле.

Полученные результаты расчета энергетических параметров кластеров приведены в табл. 1, из которой видно, что энергия связи атома углерода с кластером кремния наиболее сильно выражается для чистого кластера Si_{29} с оборванными на поверхности орбиталями, что, очевидно, связано с изменением энергии связи. Это подтверждается также тем, что отрицательно заряженные дефектные состояния сильнее связываются с углеродным атомом. Обобщенную формулу расчета ширины запрещенной зоны для легированных углеродом кластеров можно описать следующим выражением:

$$E_g = E_{\text{НОМО}} - E_{\text{ЛУМО}}, \quad (6)$$

где $E_{\text{НОМО}}$ — энергетический уровень, который наиболее близко лежит ниже от дна зоны проводимости кластера; $E_{\text{ЛУМО}}$ — энергетический уровень, который наиболее высоко лежит от потолка валентной зоны

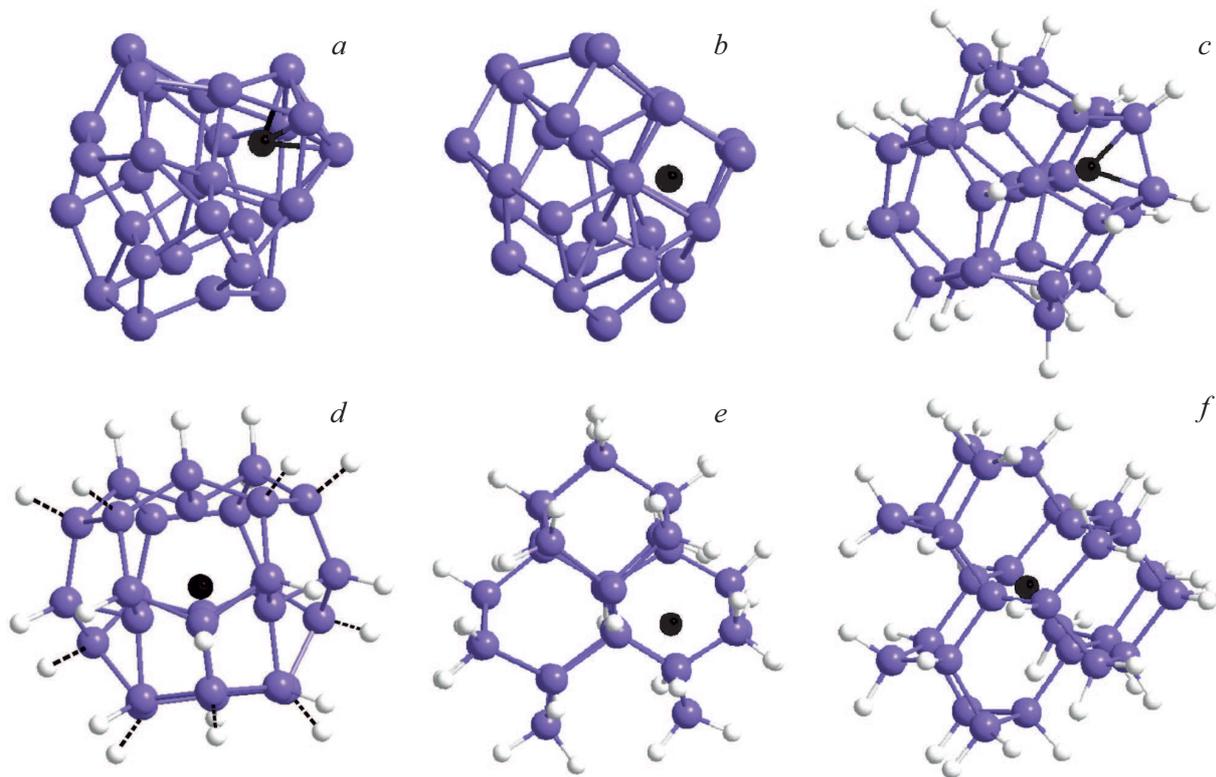


Рис. 1. Пространственная структура C_i в различных зарядовых состояниях: $Si_{29}:C_i(+)$ (a), $Si_{29}:C_i(-)$ (b), $Si_{29}H_{24}:C_i(+)$ (c), $Si_{29}H_{24}:C_i(-)$ (d), $Si_{29}H_{36}:C_i(+)$ (e), $Si_{29}H_{36}:C_i(-)$ (f). На рисунках черным кружком обозначен атом углерода, светло-голубыми — атомы водорода, синими — атомы кремния, черными штриховыми линиями обозначены слабые связи Si–H (они на доли ангстрема длиннее, чем равновесные Si–H связи). (Цветной вариант рисунка представлен в электронной версии статьи).

Таблица 1. Энергетические параметры примеси C_i в нанокластерах чистого Si_{29} и содержащих водород $Si_{29}H_{24}$ и $Si_{29}H_{36}$

	Энергия связи углерода с кластером, эВ	E_{LUMO} , эВ	E_{HOMO} , эВ	E_g , эВ
$Si_{29}:C_i(-)$	12.59	-8.61	-8.38	0.23
$Si_{29}:C_i(+)$	12.29	-8.26	-8.25	0.01
$Si_{29}H_{24}:C_i(-)$	7.51	-9.35	-9.06	0.29
$Si_{29}H_{24}:C_i(+)$	7.85	-8.86	-8.37	0.49
$Si_{29}H_{36}:C_i(-)$	6.61	-10.39	-8.96	1.43
$Si_{29}H_{36}:C_i(+)$	6.78	-9.53	-9.04	0.49

кластера. Локальные уровни, обусловленные примесными атомами углерода в запрещенной зоне кластера, незначительно влияют на края запрещенной зоны.

Это связано с тем, что, во-первых, межузельные примеси вводят обычно неглубокие уровни в запрещенную зону, во-вторых, атом углерода по энергетическим характеристикам и валентному состоянию мало отличается от кремния и поэтому такая примесь даже в замещенном положении не вносит глубоких локальных уровней. Находясь в элементарной ячейке наночастицы кремния, атом углерода из-за значительно меньшего

ковалентного радиуса (0.771 \AA), чем атомы матрицы (1.173 \AA), может находиться значительно дальше в определенном заряженном состоянии, это обстоятельство дает преимущество в расположении примесного атома углерода в межузельном положении в матрице атомов кремния, что хорошо согласуется с данными [4].

3.2. Примесные центры углерод-водород в кластерах кремния

На основе анализа литературных данных [2,4,13,14] выявлено, что водород является стабилизирующей примесью в кремнии. Далее, рассмотрим его влияние на кластеры кремния, содержащие примеси углерода. Комплексы, образованные с участием одиночных атомов водорода в кремнии, содержащие атомы углерода, были обнаружены во время DLTS экспериментов [15–17]. Было показано, что пара C_iH обладает глубоким донорным уровнем $E_C - 0.16 \text{ эВ}$. Предполагается, что C_i-H комплекс [13,16], захватив электрон, диссоциирует, изменяет свое зарядовое состояние [13,17], а затем распадается на нейтральное состояние с энергией активации 0.5 эВ [17–19]. Рассчитанные модели структур кремниевых кластеров, связанные с C_i-H примесью, приведены на рис. 2.

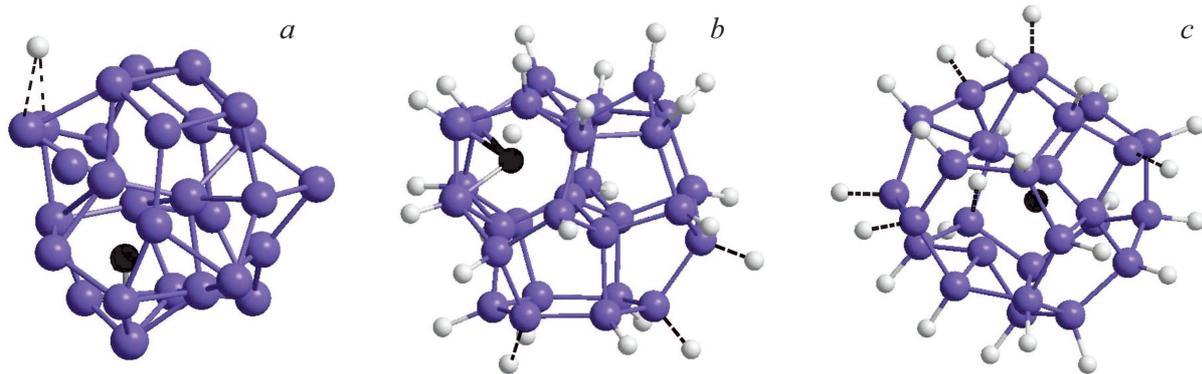


Рис. 2. Пространственная структура заряженных состояний дефектного комплекса C_i -H: $Si_{29}:C_i$ (a), $Si_{29}H_{24}:(C_iH)^+$ (b), $Si_{29}H_{24}:(C_iH)^-$ (c). На рисунках черным кружком обозначен атом углерода, светло-голубыми — атомы водорода, синими — атомы кремния, черными штриховыми линиями обозначены слабые связи Si–H (они на доли ангстрема длиннее, чем равновесные Si–H связи).

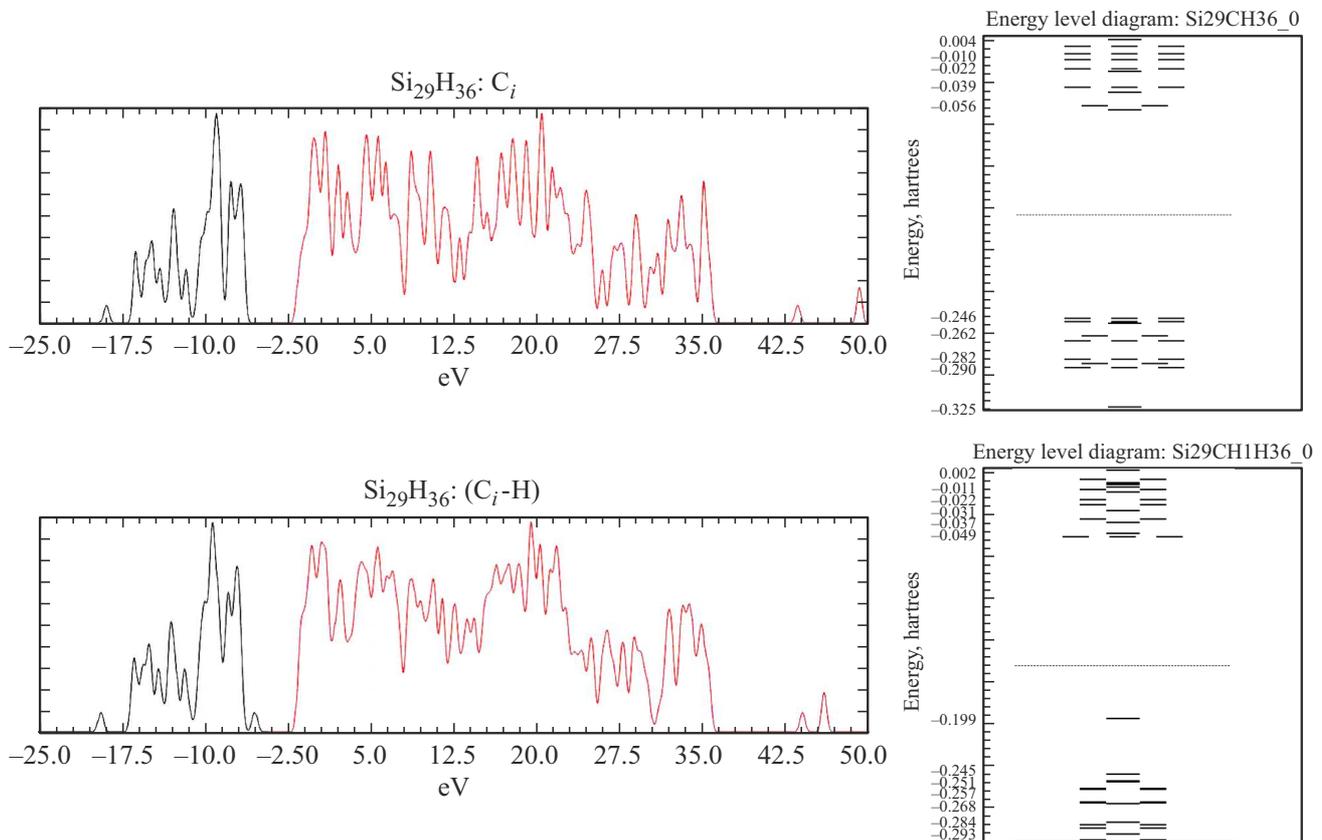


Рис. 3. Образование энергетических уровней в запрещенной зоне в кластере $Si_{29}H_{36}$, обусловленном внедрением примесных атомов углерода и водорода.

Электроотрицательность углерода относительно кремния больше, но вблизи дефектного центра C_i -H электронная конфигурация кремния может перейти от $3s^23p^2$ в $3s^3p^3$ [14,20,21]. При этом также наблюдается слабое проявление перехода электрона кремния из p^2 орбитали в d , вследствие чего изменяется электронная конфигурация комплекса C–H–Si. На

основе этого было высказано предположение, что структура этого комплекса представляет собой связь атома водорода между замещенным C и соседним Si атомом. Нами найдено, что энергия связи нейтрального H–C равна -1.17 эВ и что дефект является бистабильным. В положительных и нейтральных зарядовых состояниях H находится недалеко от центра

Таблица 2. Энергетические параметры дефектного комплекса C_i -H в нанокластере кремния

	Энергия связи дефектного комплекса, эВ	E_{LUMO} , эВ	E_{HOMO} , эВ	E_g , эВ
$Si_{29}:C_iH$	12.34	-8.29	-8.19	0.10
$Si_{29}:C_iH(+)$	12.58	-8.04	-7.93	0.11
$Si_{29}:C_iH(-)$	12.15	-8.57	-8.47	0.10
$Si_{29}H_{24}:C_iH$	7.53	-8.67	-8.15	0.52
$Si_{29}H_{24}:C_iH(+)$	7.68	-8.06	-7.11	0.95
$Si_{29}H_{24}:C_iH(-)$	7.45	-9.31	-9.22	0.09

связи C–Si [20], однако в отрицательном состоянии водород находится с противоположной стороны к этой связи. Вклад в формирование глубокого уровня в запрещенной зоне кластера вносит межузельный примесный атом углерода, образуя дефектный центр H–C, представленный в виде графика на рис. 3. Второй атом H может задерживаться возле дефекта. Водород образует прочные связи с межузельным дефектом, где энергия связи H составляет -3.14 эВ. Сформированные структурные дефектные состояния, с участием водорода, быстро мигрируют и легко реагируют с другими дефектами, подавляя их концентрации. Присутствие атомов H приводит к ликвидации электрической активности.

Из табл. 2. видно, что энергия связи дефектного комплекса углерод-водород с кластером кремния уменьшается в гидрогенизированных кластерах. Вместе с тем положительное и нейтральное зарядовые состояния дефекта проявляют локальные уровни глубоко в запрещенной зоне, тогда как отрицательное состояние дает мелкий уровень над валентной зоной нанокластера.

Энергии связи дефектного комплекса рассчитывали по формуле [20,21], с учетом энергии связи атомов дефекта с участием межузельного углерода и водорода в кластере кремния:

$$E_f = E(Si_{n-1}XH_iH_m) - E(Si_nH_m) + \mu_{Si} - \mu_X + l\mu_H, \quad (7)$$

где E_f — энергия образования дефектного комплекса, $E(Si_{n-1}XH_iH_m)$ — полная энергия гидрогенизированного кластера с дефектом, $E(Si_nH_m)$ — полная энергия гидрогенизированного кластера без дефекта, μ_{Si} — полная энергия одного атома кремния в данном кластере, μ_X — полная энергия одного атома углерода в данном кластере, μ_H — полная энергия одного атома водорода в данном кластере (если в локальную область вокруг атома углерода вводится больше одного атома H, то ставится l , т.е., l — количество внедренных атомов H в области вокруг C_i).

Результаты расчетов энергетических параметров дефектного комплекса C_i -H в нанокластере кремния приведены в табл. 2.

Из табл. 2 видно, что энергия связи C_i -H в кластере слабо зависит от зарядового состояния H, а определяет-

ся числом атомов водорода в кластере. Гидрогенизация оборванных связей кластера приводит, с одной стороны, к стабилизации дефекта, а с другой — к ослаблению связей примесного атома C_i с окружающими атомами Si.

4. Заключение

В результате исследований структуры и электронных состояний кремниевых нанокластеров, содержащих атомы углерода и внедренных атомов водорода, установлено, что примесные атомы углерода, располагаясь в межузельном состоянии, образуют мостиковую связь с двумя атомами кремния и находятся в гексагональном положении в центре ячейки. Отрицательно заряженное состояние углерода приводит к упрочнению связи. Единичный примесный атом углерода дает мелкие уровни в запрещенной зоне нанокремния.

Показано, что наличие одного атома водорода в области нахождения C_i стимулирует образование дефектного комплекса C_i -H-Si и снижает энергию связи дефекта в кластере $Si_{29}:C_i$.

Выявлено, что положительное и нейтральное зарядовые состояния дефекта проявляют локальные глубокие уровни, а отрицательное состояние дает мелкий уровень в запрещенной зоне нанокластера.

Присутствие водорода приводит к нейтрализации электрически активного состояния мелкого уровня в кластере $Si_{29}:C_i$. Структурное и энергетическое состояние атома C в дефектном комплексе C_i -H-Si зависит от числа атомов водорода.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

- [1] М.Г. Мильвидский, В.В. Чалдышев. ФТП, **32**, 513 (1998).
- [2] K.L. Brower. Phys. Rev. B, **9**, 2607 (1974).
- [3] G.D. Watkins, K.L. Brower. Phys. Rev. Lett., **36**, 1329 (1976).
- [4] A. Mattoni, F. Bernardini, L. Colombo. Phys. Rev. B, **66**, 195214 (1-6) (2002).
- [5] D. Tsuchiya, K. Sueoka, H. Yamamoto. Phys. Status Solidi A, **216**, 1 (2019).
- [6] А.Я. Нашельский. Производство полупроводниковых материалов (М., Металлургия, 1989) с. 272.
- [7] В.И. Фистуль. Атомы легирующих примесей в полупроводниках (М., Физматлит, 2004) с. 431.
- [8] Z.M. Khakimov, P.L. Tereshchuk, N.T. Sulaymonov, F.T. Umarova, M.T. Swihart. Phys. Rev. B, **72**, 115335 (2005); M.Yu. Tashmetov, A.B. Normurodov, N.T. Sulaymanov, Sh. Makhkamov, F.T. Umarova, A.V. Khugaev, Kh.M. Kholmedov. J. Nano-Electron. Phys., **10**, 0301 (1–6) (2018).
- [9] Z.M. Khakimov. Comput. Phys. Commun., **147**, 733 (2002).
- [10] K. Raghavachari, C.M. Rohlfing. Chem. Phys. Lett., **167**, 559 (1990); Run-Ning Zhao, Zi-Chen Lu, Rui Chenaand Ju-Guang Han. Phys. Chem. Chem. Phys., **21**, 25302 (2019).

- [11] P. Deák, T. Frauenheim, M.R. Pederson (eds). *Computer Simulation of Materials at Atomic Level* (Berlin, 2000) Chap. 3; T. Frauenheim, G. Seifert, M. Elstner, Z. Hajnal, G. Jungnickel, D. Porezag, S. Suhai, R. Scholz. *A Self-Consistent Charge Density-Functional Based Tight-Binding Method for Predictive Materials Simulations in Physics, Chemistry and Biology*.
- [12] Z.M. Khakimov. *J. Phys.: Conf. Ser.*, **29**, 177 (2006).
- [13] V.P. Markevich, B. Hourahine, R.C. Newman, R. Jones, Mats Kleverman, Lennart Lindström, L.I. Murin, M. Suzawa, S. Öberg, P.R. Briddon. // Publication in Lund University research portal /<http://www.scientific.net/3-908450-83-7/>. **221** (2), 1 (2003).
- [14] M.V. Kovalenko, L. Manna, A. Cabot, Z. Hens, D.V. Talapin, C.R. Kagan, V.I. Klimov, A.L. Rogach, P. Reiss, D.J. Milliron, Ph. Guyot-Sionnest, G. Konstantatos, W.J. Parak, T. Hyeon, B.A. Korgel, Ch.B. Murray, W. Heiss. *ACS Nano* **9**, 1012 (2015).
- [15] E. Van Lenthe, E.J. Baerends. *J. Comp. Chem.*, **24**, 1142 (2003).
- [16] А.К. Ширяев. *Квантовая механика и квантовая химия* (Самара, Самарский ГТУ, 2014).
- [17] Л.В. Спивак, Н.Е. Щепина. *Физико-химические основы процессов микро- и нанотехнологии* (Пермь, Перм. гос. нац. исслед. ун-т, Электрон. дан. — 2018) ч. 1, 34,5 Мб; с. 202.
- [18] D.M. Fleetwood, S.T. Pantelides, R.D. Schrimpf. *Defects in Microelectronic Materials and Devices* (N.Y., Taylor & Francis Group, 2009) p. 737.
- [19] V.I. Kolkovskaya, R. Stübnerb, K. Gwozdzc, J. Weber. *Physica B*, **535**, 128 (2018).
- [20] Z. Zhou, R.A. Friesner, L. Brus. *J. Am. Chem. Soc.*, **125**, 15599 (2003).
- [21] Sh. Makhkamov, F.T. Umarova, A.B. Normurodov, N.T. Sulaymanov, O.B. Ismailova. *Uzbek. Phys. J.*, **18**, 82 (2016).

Редактор А.Н. Смирнов

Effect of hydrogen on the structure and electronic states of SiC nanoclusters containing carbon impurities

M.Yu. Tashmetov¹, Sh.M. Makhkamov¹,
F.T. Umarova¹, A.B. Normurodov¹, N.T. Sulaymanov¹,
A.V. Khugaev¹, Kh.M. Kholmedov²

¹ Institute of Nuclear Physics,
Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan,
100214 Tashkent, Uzbekistan

² Tashkent University of Information Technologies
named after al-Khwarizmi,
100084 Tashkent, Uzbekistan

Abstract The structural and electronic states of defective complexes in the Si₂₉ cluster with the participation of carbon and hydrogen atoms were determined by the method of non-conventional strong binding in combination with the method of molecular dynamics. It is shown that carbon atoms in silicon clusters form a bridge bond with two silicon atoms and are in a hexagonal position at the center of the cell, forming a defect of the Si₂₉:C_i type. The introduction of hydrogen into a silicon cluster results in the formation of a defective C_i-H-Si complex and a decrease in the binding energy of the Si₂₉:C_i defect. Based on the calculations, it was found that carbon gives shallow levels in the band gap of nano-silicon, and the defective carbon-hydrogen complex in a hydrogenated cluster, depending on the charge state of the defective complex, exhibits both deep and shallow levels.