

# ESTRUCTURA ELECTRÓNICA E INTERACCIONES HIPERFINAS DE COMPLEJOS Cd-P EN SILICIO

R.A Casali<sup>1</sup> y M.A.Caravaca<sup>2</sup>

1. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura, Universidad Nacional del Nordeste, Av. Libertad 5600, 3400 Corrientes
2. Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Nordeste, Av. Las Heras 727, Resistencia.

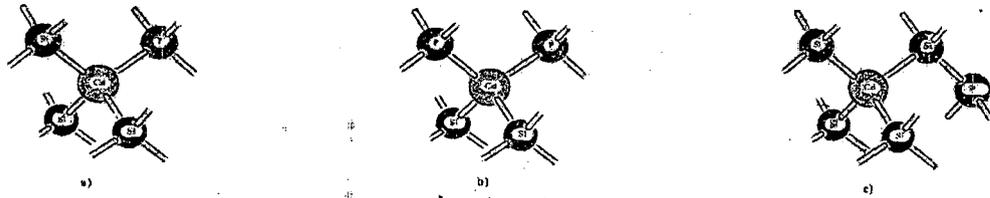
Cd-P forma pares en Silicio dando origen a gradientes de campo eléctricos (EFG) cuya intensidad y simetría dependen de la estructura del par y su estado de carga. Mediante métodos de estructura electrónica ab-initio, se determinó que el átomo sonda Cd forma par con el P con energías de enlace de 1.31 eV y posee dos estados de cargas (0 y -1) con muy diferentes EFG. Este par a su vez puede pasivarse eléctricamente enlazando con una energía de 1.30 eV a un segundo átomo de P (formando el complejo estable Cd-P<sub>2</sub>). Los parámetros  $\eta$ , EFG calculados para Cd-P<sup>(0)</sup>, Cd-P<sup>(-1)</sup> y Cd-P<sub>2</sub> muestran un muy buen acuerdo con observaciones experimentales.

El Si dopado con donores P y sometido a la implantación de <sup>111</sup>In radioactivo (que decae a <sup>111</sup>Cd) da origen a interesantes complejos microscópicos Cd-P cuyos gradientes de campo eléctrico y parámetros de asimetría pueden ser usados para identificar experimentalmente, y con cierto grado de precisión la estructura del par y su simetría [1,2]. Por otra parte, el Cd (impureza aceptora profunda) y el donador, en conjunto, se comportan como un centro eléctricamente activo, tipo aceptor +1, pudiendo verificarse su actividad eléctrica (transiciones entre estados neutro y cargado -1) tanto en la técnica de espectroscopia nuclear *Perturbed Angular Correlations* (PAC) [1,2] como con la técnica *Deep Level Transient Spectroscopy* (DLTS)[2]. Sin embargo, una completa caracterización, tanto en las propiedades electrónicas, estructurales y cantidad y tipo de átomos constituyentes no es posible sin la ayuda de refinados métodos *all-electron* de estructura electrónica.

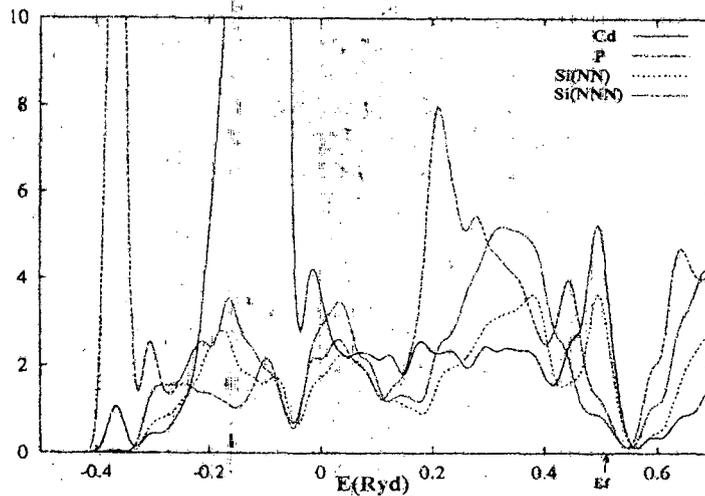
En el presente trabajo, mediante métodos ab-initio FP-LMTO [3,4] sin restricción en la simetría de los potenciales y densidades de carga en el entorno del núcleo, se determinaron estructura microscópicas, EFG,  $\eta$ , e importantes factores como: estado de carga en función de la energía de Fermi y energías de enlace de cada complejo. El estudio se realizó mediante la repetición periódica de celdas conteniendo en su interior el complejo y 30 a 52 átomos de Si, de acuerdo a las metodología explicada estudios anteriores de Cd, y Cd-H en Si [5,6]. Sin embargo, en el presente caso se han hallado los mínimos de energías locales mediante el NFP-LMTO [4,7] minimizando las fuerzas calculadas mediante la técnica de dinámica molecular "simulated annealing", de mayor eficiencia. Los decaimientos y radios de suavizado de las funciones bases atómicas, constituidas por gaussianas (usada en la zona de carozo) y funciones de Hankel (parte del radio muffin tin y la zona intersticial) [7] usadas en los cálculos fueron optimizadas individualmente en cada átomo en compuestos elementales (Cd metálico, Si estructura diamante y AlP para el caso de Cd, Si y P respectivamente) mediante la técnica gradientes conjugados. En la figura 1 se muestran las disposiciones atómicas mas importantes estudiadas. En todos los casos (a no ser que se mencione lo contrario) todos los átomos fueron colocados en posiciones

sustitucionales correspondientes al Si perfecto. En la figura 2 se muestra la densidad de estados parciales del sistema Cd-P neutro en Si (ambos sustitucionales) disposición primeros vecinos. Esta figura, es una pieza notable de información de la estructura microscópica del sistema y podemos extraer la siguiente importante información: a) la energía de Fermi cae en una zona correspondiente a estados de valencia del sistema. Los átomos que más contribuyen son el Cd y sus tres Si NN, con picos de la PDOS muy próximos a  $E_f$ . El P contribuye a  $E_f$  en mucho menor grado a la DOS que el Cd y sus Si NN, así como cada Si NNN (segundos vecinos). b) Cuando se carga la supercelda con 1 electrón,  $E_f$  incrementa a  $E_f^{(-1)}$  y las PDOS decaen a valores despreciables. Como las integrales de las PDOS entre  $E_f^{(0)}$  y  $E_f^{(-1)}$  dan la acumulación de la carga en las esferas atómicas, se concluye que la carga adicional se localiza en el Cd, Si NN y en mucho menor grado en el P y los 7 Si NNN. El P, con 5 electrones, usa dos electrones para enlazar con el Cd y los tres restantes para enlazar con los tres Si NNN al Cd. Esto se entiende como una deactivación del P. Entonces la carga (-1) tomada del reservorio se acumula entre los enlaces no saturados Cd-3Si NN. Este efecto se aprecia en las distancias relajadas entre el Cd y sus primeros vecinos: cuando el sistema se carga (-1) la distancia Cd-P permanece constante y mientras que las Cd-3Si NN disminuyen (debido al potencial de deformación +1 eV en el tope de banda del bulk Si). Estas redistribuciones de carga y distancias interatómicas tienen un efecto profundo en el gradiente de campo eléctrico: cuando el complejo se carga, todos los enlaces están saturados y el principal causante del gradiente es el exceso de carga nuclear del átomo de P (+5) comparado con los SiNN(+4). Cuando el complejo es neutro, la carga perdida proviene de los tres enlaces Cd-SiNN, cancelándose de esta forma el desequilibrio proveniente del exceso de carga en el P. Se ha determinado que para energías de Fermi del reservorio por debajo de 0.52 eV (cercano al centro del gap de Si) el sistema es neutro, mientras en el resto es (-1). Los valores  $\eta$ , EFG calculados se muestran en la tabla I. El  $\eta=0$  (0 experimental), para Si:Cd-P<sup>NN(0)</sup> coincide con la simetría  $C_{3v}$  del complejo, mientras que  $\eta=0.715$  (0.72 experimental)

para Si:Cd-P<sub>2</sub> indica en forma inequívoca una simetría distinta a la C<sub>3v</sub>.



**Fig 1:** Configuraciones para los complejos Cd-P: a) Cd y P próximos vecinos; b) Cd enlazado con dos átomos de P; c) P colocado en posición en segundos vecinos sustitucional.



**Fig 2:** Densidad de estados parciales por átomo en unidades arbitrarias para el Cd-P, estado de carga neutro. Observar las densidades de estados de Cd, P y Si próximos vecinos al Cd, en las cercanías de la energía de Fermi.

COMPLEJO	EFG <sup>T</sup> (MHz)	η <sup>T</sup>	Eb <sup>T</sup> (eV)	EFG <sup>exp</sup> (MHz)	η <sup>exp</sup>
Si:Cd-P <sup>NNN</sup> (0)	59	0.0	1.31	36-72	0.0
Si:Cd-P <sub>2</sub>	198	0.715	1.31+1.30	195	0.72
Si:Cd-P <sup>NNN</sup>	42	0.6	0.6	-	-
Si:Cd-P <sup>NNN</sup> (-1)	193	0.0	-	180	0.0

**Tabla I:** Resumen de las propiedades hiperfinas y de enlace teóricas (T) y experimentales (refs. [1,2]) así como las energías de enlace calculadas entre las impurezas en función del complejo.

#### Referencias

- [1] N.Achtziger and W.Witthuhn, Phys. Rev. B **47**, 6990 (1993).
- [2] N.Achtziger, S.Deubler, D.Forkel, H.Wolf and W.Witthuhn, Appl. Phys. Lett. **55**, 766 (1989)
- [3] M.Methfessel, Phys. Rev. B **38**, 1537 (1989)
- [4] M.Methfessel, NFP Manual, (Institute for Semiconductor Physics, Frankfurt Oder, 1997)
- [5] R.A.Casali, M.A.Caravaca and C.O.Rodríguez, Phys. Rev. B **54**, 16701, (1996)
- [6] M.A.Caravaca, R.A.Casali and C.O.Rodríguez, Physical Review B, **57**, 14580 (1998).
- [7] M.Methfessel, M.V.Schilfgaarde and R.A.Casali, "FP LMTO based on Smooth Hankel functions", Lectures Notes in Solid State Science, Springer Verlag (en prensa). Download: [www.ihp-ffo.de/~msm](http://www.ihp-ffo.de/~msm) (NFP paper).