

МОДЕЛИРОВАНИЕ $L_{2,3}$ СПЕКТРА РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ КРЕМНИЯ В α - SiO_2 С ПОМОЩЬЮ ПРОГРАММНОГО ПАКЕТА QUANTUM ESPRESSO

Р.В. Волвенков, О.И. Дубровский

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Воронежский государственный университет»,
394018, Россия, г. Воронеж, Университетская площадь, 1

dubrovskiy@phys.vsu.ru

С помощью программного пакета Quantum ESPRESSO выполнен расчет $L_{2,3}$ XANES спектра кремния в α -кварце. Проведено сравнение с соответствующими экспериментальными результатами.

Ключевые слова: диоксид кремния, электронная структура, плотность электронных состояний, программный пакет Quantum ESPRESSO, спектр XANES.

В микроэлектронике диоксид кремния является одним из основных материалов, и широкое использование SiO_2 делает этот материал крайне важным для текущих экспериментальных и теоретических исследований. Несмотря на то, что электронная структура этого соединения достаточно интенсивно изучалась и изучается как экспериментально, так и теоретически, некоторые ее особенности остаются не вполне ясными, так что подобные исследования не потеряли своей актуальности. Одним из экспериментальных методов, позволяющих получать информацию об электронном строении материала, является метод рентгеновской спектроскопии ближней тонкой структуры края поглощения (XANES). С его помощью можно экспериментально определить распределение локальных парциальных плотностей свободных электронных состояний в зоне проводимости. Естественно, для анализа и надёжной интерпретации имеющихся экспериментальных результатов необходимо проведение компьютерных расчетов исследуемых спектров «из первых принципов».

В данной работе для моделирования XANES-спектров использовался программный пакет Quantum ESPRESSO [1]. С его помощью был выполнен соответствующий расчет для наиболее близкой к природному оксиду модификации диоксида кремния – α -кварца (α - SiO_2). Необходимые для расчёта параметры кристаллической структуры α - SiO_2 были взяты из базы данных проекта МИНКРИСТ [2]. Элементарная ячейка α - SiO_2 приведена на рисунке 1, она содержит 3 ато-

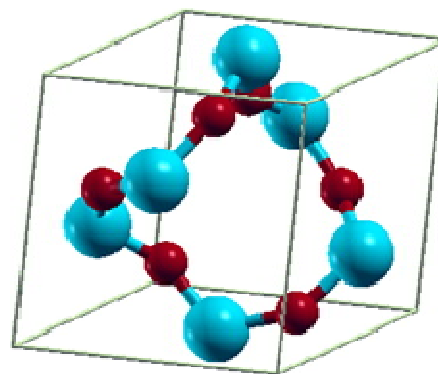


Рис. 1. Элементарная ячейка α - SiO_2 (синим цветом обозначены атомы Si, красным – атомы O).

ма Si и 6 атомов O. В работе был рассчитан XANES спектр $L_{2,3}$ -края для кремния в α -кварце. Как известно, в дипольном приближении XANES $L_{2,3}$ -спектр отражает распределение локальной парциальной плотности состояний s -, и d -симметрии в зоне проводимости и представляет собой наложение двух спектров – L_3 и L_2 , соответствующих переходам из $2p_{3/2}$ и $2p_{1/2}$ состояний, соответственно. При этом L_2 смещен относительно спектра L_3 в направлении более высоких энергий на значение энергии спин-орбитального расщепления Si $2p$ -основного уровня. Кроме того, из-за двойного заполнения $2p_{3/2}$ уровня по сравнению с уровнем $2p_{1/2}$, соотношение интенсивностей L_3 и L_2 спектра должно быть 2:1. Отметим, что для расчета XANES-спектра использовалось приближение «остовной дырки», описанное в [3]. При этом вычисления проводились для суперъчейки размера $2 \times 2 \times 2$, один из атомов кремния в которой содержал «остовную дырку» на уровне $2p$.

Рассчитанный спектр представлен на рисунке 2, он совмещен с соответствующим экспериментальным спектром [4], также представленным на том же рисунке, по положению главного максимума. Спектр имеет характерную структуру, состоящую из выраженного главного максимума и двух дополнительных в более низкоэнергетической области. Можно отметить достаточно хорошее согласие между результатами нашего расчета и экспериментальным спектром, что свидетельствует о высокой достоверности результатов моделирования, предпринятого в данной работе.

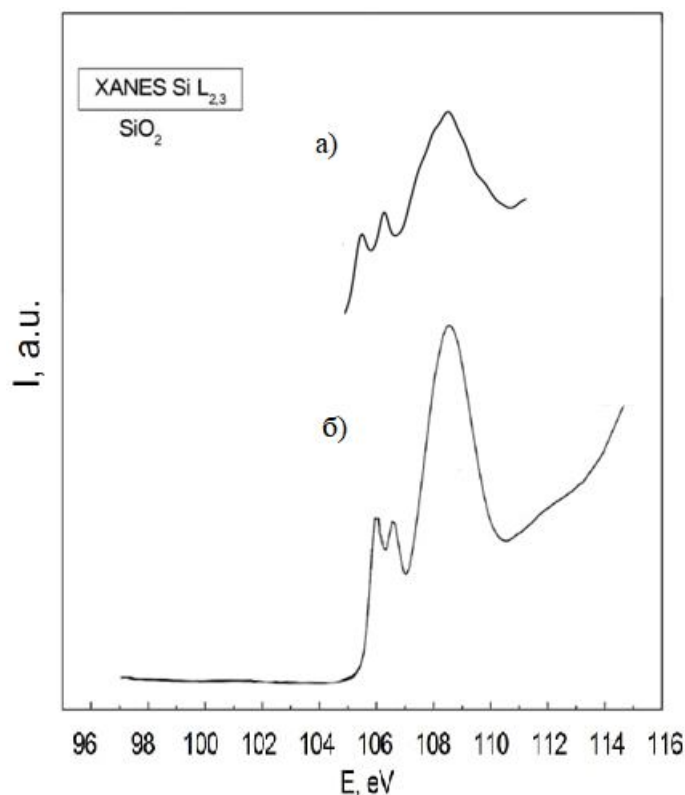


Рис. 2. XANES спектр $L_{2,3}$ -края поглощения кремния в α -SiO₂.
а) – наш расчет; б) – эксперимент [4].

Литература

1. Gianozzi P. Quantum ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / P. Gianozzi, S. Baroni, N. Bonini [etc.] // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2009. – Vol. 21, № 39. – P. 395502 (19).
2. <http://database.iem.ac.ru/mincryst/rus/index.php>
3. Теоретическое и экспериментальное исследование электронной структуры диоксида олова / С.И. Курганский, М.Д. Манякин, О.И. Дубровский [и др.], // Физика твердого тела. – 2014. – Т. 56, Вып. 9. – С. 1690-1695.
4. S.I.Kurganskii. Natural surface oxidation consideration in first principles modeling of the X-ray absorption near edge fine structure of silicon / S.I.Kurganskii, O.A.Dezhina, M.D.Manyakin, E.V.Parinova, D.A.Koyuda, S.Yu.Turishchev // Results in Physics. – 2020. – P.1-6.

MODELING OF THE $L_{2,3}$ X-RAY ABSORPTION SPECTRUM OF SILICON IN THE α -SiO₂ USING THE SOFTWARE PACKAGE QUANTUM ESPRESSO

R. V. Volvenkov, O. I. Dubrovskii

Federal State Budget Educational Institution of Higher Education "Voronezh State University"

The $L_{2,3}$ XANES spectrum of silicon in α -quartz has been calculated using the Quantum ESPRESSO software package. A comparison is made with the corresponding experimental results.

Keywords: silicon dioxide, electronic structure, density of electronic states, software package Quantum ESPRESSO, XANES spectrum.