Электронная структура субоксидов кремния SiO_x : *ab initio* моделирование

Перевалов Т.В.^{1,2}

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

² Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

DOI 10.34077/Semicond2019-334

$\text{SiO}_{x<2}$ является перспективным материалом для использования в качестве запоминающего слоя ячейки резистивной памяти (Resistive Random-Access Memory, RRAM) [1]. Несмотря на многочисленные исследования SiO_x , обусловленные его использованием в оптоэлектронных устройствах и солнечных элементах, электронная структура SiO_x систематически не изучена. Чёткое понимание электронной структуры SiO_x различного состава необходимы для контроля его свойств и оптимизации технологии RRAM на основе SiO_x . Целью работы является исследование электронной структуры $\text{SiO}_{x<2}$ с помощью *ab initio* моделирования.

Моделирование проводилось в программном пакете Quantum ESPRESSO, основанном на теории функционала плотности с корректным воспроизведением значений ширины запрещённой зоны. Структура SiO_x моделировалась последовательным удалением атомов кислорода из 18-атомной суперячейки $\alpha\text{-SiO}_2$ с последующей полной структурной релаксацией. Критериями выбора атомов кислорода для удаления были минимум полной энергии ячейки и равномерное уменьшение её объёма.

Рис. 1. – Рассчитанные и экспериментальные значения ширины запрещенной зоны (a) и показателя преломления (b) SiO_x . (c) Энергетическая диаграмма SiO_x .

Корректность расчётной методики подтверждается согласием рассчитанных и взятых из литературы экспериментальных зависимостей величины запрещённой зоны (E_g), а также показателя преломления (n) SiO_x от величины x (рис. 1). Расчётное значение $E_g = 8.0$ эВ для SiO_2 согласуется с известными из литературы данными, тогда как для чистого Si расчёт переоценивает E_g , что объясняется использованием в расчётах точной структуры SiO_2 и модельной для Si.

Спектры парциальной плотности состояний SiO_x , совмещённые по краю нижней ($\text{O}2s$) валентной подзоны на 18.3 эВ ниже E_v для SiO_2 (глубокие уровни наименее чувствительны к атомному окружению), позволяют построить энергетическую диаграмму SiO_x (рис. 1(c)). Диаграмма построена с использованием факта, что E_v в аморфном (a-) и кристаллическом (c-) Si имеют энергию 5.2 эВ от уровня электрона в вакууме; $E_g=1.1$ эВ для c-Si и 1.6 эВ и для a-Si. Приведённая диаграмма позволяет оценить энергию потенциальных барьеров для электронов (Φ_e) и дырок (Φ_h) на границе a-Si/ SiO_x и c-Si/ SiO_x для различных значений x . Уменьшение E_g при обогащении SiO_x кремнием осуществляется за счёт примерно симметричного сдвига E_v и E_c в запрещённую зону SiO_2 . Верх валентной зоны SiO_x формируется $\text{Si}3p$ атомными орбиталями. Сдвиг E_v с

уменьшением параметра x можно объяснить тем, что добавление O в SiO_x сопровождается увеличением энергии связующих орбиталей Si – Si связи.

[1] A. Mehonic et al., *Adv. Mater.*, **30**, 1801187 (2018).

[2] S. M. A. Durrani et al. *J. Phys. Condens. Mat.*, **15**, 8123-8135 (2003).

[3] N. Tomozeiu, *Optoelectronics - Materials and Techniques, InTech*, 2011, 484 p.

[4] K. N. Mao et al., *Sci. Rep.*, **6**, 19289 (2016).

[5] W. A. Harrison, *Phys. Rev. B*, **31**, 2121 (1985).