

## معيار پایداری سیستم های کوچک Si-Ge

مسعود نهالی<sup>۱</sup>، علی مهري<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup> هیات علمی دانشگاه صنعتی نوشیروانی بابل، دانشکده علوم پایه، بابل

<sup>۲</sup> هیات علمی دانشگاه صنعتی نوشیروانی بابل، دانشکده علوم پایه، بابل

نام و نشانی ایمیل نویسنده مسئول:

مسعود نهالی

[masoud.nahali@gmail.com](mailto:masoud.nahali@gmail.com)

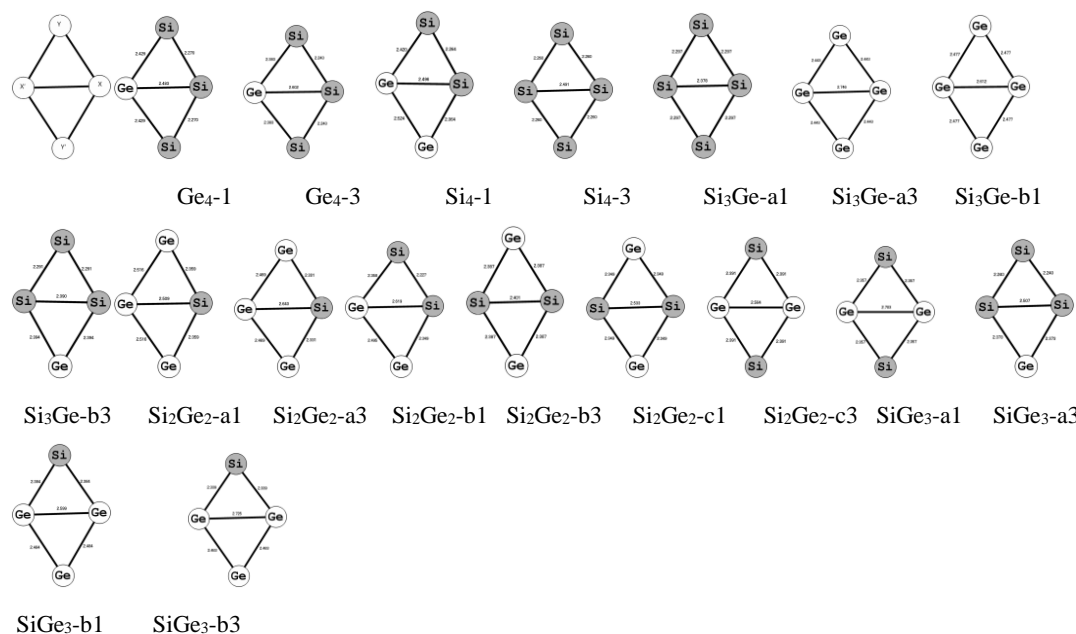
### چکیده

بررسی تئوری نانو ساختارهای  $\text{Si}_4\text{Ge}_{4-x}$  ( $x=0-4$ ) با استفاده از روش های DFT متا هیبریدی تروهلاز انجام شده است. توابع پایه MG3S و برخی توابع پایه نسبیتی برای بهتر شدن کیفیت محاسبات استفاده شده است. انرژی یونیزاسیون و انرژی اتمی شدن محاسبه توسط این روش سازگاری خوبی با روش های تجربی دارد. ساختار، توزیع بار، فرکانس ارتعاشی ساختارها در تمام موارد مورد بررسی قرار گرفته اند. نکته جالبی که با تجربه هم همخوانی خوبی دارد این است که در تمام این ساختارها پایداری پیوند قطری نانو ساختار تعیین کننده پایداری سیستم است.

واژگان کلیدی: کوانتوم، کلاستر، اسپین، Si-Ge

## مقدمه

ترکیبات Si-Ge در حال استفاده به عنوان مواد جدید نه تنها برای صنعت کامپیوتر و آی-سی بلکه برای کاربردهای اپتوالکترونیک هستند [1]. بررسی تئوری ترکیبات کوچک سیلیکون - ژرمانیم به خصوص در سطح نانومتری از لحاظ تجربی مشکل است و فهمیدن شیمی فیزیک آن‌ها بسیار با اهمیت است [2]. هدف از این کار بررسی ترکیبات کلاستری  $Si_4Ge_{4-x}$  ( $x=0-4$ ) و چگونگی پایداری آن‌هاست. این بررسی شامل محاسبه انرژی، فرکانس ارتعاشی، توزیع بار، و توزیع اسپینی تمام ساختارها می‌باشد. ساختارهای جدیدی مورد بررسی و محاسبه قرار گرفته‌اند و بررسی دقیق توزیع دانسیته اسپینی برای تمام ایزومرهای که حالت پایدار پایه آن‌ها اسپینی است صورت پذیرفته است. در اینجا از روش DFT پایه‌گذاری شده توسط گروه تروهلار استفاده شده است. برای افزایش دقت محاسبات از توابع پایه MG3S و پتانسیل‌های نسبیتی SDB برای ژرمانیم استفاده گردیده است. مسلماً استفاده از ترکیبی از این روش‌ها و توابع پایه دقت بهتری نسبت به روش کلاسیک  $MPW1B95/6-31+G^*$  ایجاد کرده است. روش LSDA [3] قادر به پیش‌بینی مناسب انرژی یونیزاسیون نیست از این رو در سال ۲۰۰۴ تروهلار و همکارانش روش MPW1B95 را پیشنهاد کردند [4] که قادر بود انرژی یونش، انرژی اتمی شدن، و طول پیوند را با دقت بالایی محاسبه کند و به همین دلیل در این کار از آن استفاده شده است. توابع پایه MG3S و SDB-aug-cc-pvtz به نوعی انتخاب شده‌اند که علاوه بر دقت شهود شیمی فیزیکی لازم برای تفسیر کیفی هم حاصل شود. تمام ساختارهای Si-Ge با استفاده از روش MPW1B95 بهینه‌سازی شده است. ساختارهای بهینه‌شده در شکل ۱ مشاهده می‌شوند. ساختارهای هم هسته مانند  $Si_4-1$  و  $Ge_4-1$  از لحاظ توزیع بار بسیار متفاوت هستند. برای  $Ge_4-1$  بار روی موقعیت‌های  $Y$  و  $Y'$  منفی و روی  $X$  و  $X'$  مثبت است اما این مقادیر برای  $Si_4-1$  برعکس است. در جدول ۱ انرژی نسبی تمام ساختارهای بهینه‌شده مشاهده می‌شود. در ساختار  $Si_3Ge$ ،  $Ge$  می‌تواند در موقعیت متفاوتی قرار بگیرد ولی پیوند قطری Si-Si تعیین‌کننده ساختار پایدار است. جالب است که اتم‌های  $Ge$  در تمام ساختارهای  $Si_2Ge_2$  اگر در مکان  $X$  و  $X'$  باشند بار مثبت و اگر در مکان‌های  $Y$  و  $Y'$  باشند بار منفی کسب می‌کنند.



شکل ۱: ساختارهای بهینه‌شده کلاسترهای Si-Ge

از آنجایی که پیوند Si-Si قوی‌تر از Si-Ge و Ge-Ge است پیوند قطری Si-Si، Si-Ge، Si-Ge، Ge-Ge به ترتیب تعیین‌کننده ساختار پایدار در این کلاسترهاست. این موارد با محاسبات بسیار دقیق CCSD(T) [5] سازگاری کامل دارد. در ساختار  $Si_3Ge$ ،  $Ge$  می‌تواند در موقعیت متفاوتی قرار بگیرد ولی پیوند قطری Si-Si تعیین‌کننده ساختار پایدار است. از آنجایی که اسپین این ساختارها اهمیت فراوانی دارد توزیع اسپین در تمام ساختارها محاسبه و در جدول ۲ گزارش شده است. در تمام ساختارهای با اسپین بالا بیشتر از ۹۵ درصد از اسپین‌ها روی موقعیت  $Y$  و  $Y'$  قرار دارد. ساختار  $SiGe_3-b-1$  با پیوند قطری Si-Ge پایدارترین ساختار در خانواده  $SiGe_3$  است و این محاسبه کاملاً با محاسبات دقیق ویلگوس [5] سازگار است. توزیع باری که توسط ویلگوس گزارش شده است با مقادیری که ما توسط روش MPW1B95 محاسبه کرده‌ایم از نظر مقداری متفاوت است ولی به‌طور کلی مقادیر نسبی بار منفی‌تری روی Si نسبت به Ge پیش‌بینی می‌کند.

جدول ۱: انرژی نسبی و بار ساختارهای بهینه شده. مقادیر داخل پرانتز در (J. Chem. Phys. 128, 144305 (2008) گزارش شده است.

کلاستر	بار مولیکن				انرژی نسبی eV
	X	X'	Y	Y'	
Ge4-1	۰/۱۲۷	۰/۱۲۷	-۰/۱۲۷	-۰/۱۲۷	۰/۰۰۰
Ge4-3	۰/۱۷۰	۰/۱۷۰	-۰/۱۷۰	-۰/۱۷۰	۰/۸۷۸
Si4-1	-۰/۰۰۹	-۰/۰۰۹	۰/۰۰۹	۰/۰۰۹	۰/۰۰۰
Si4-3	۰/۰۶۵	۰/۰۶۵	-۰/۰۶۵	-۰/۰۶۵	۰/۷۹۶
Si3Ge-a1	۰/۰۲۶	۰/۰۲۶	-۰/۰۷۶	۰/۰۲۴	۰/۰۰۰
	-۰/۲۶۱	-۰/۲۶۱	۰/۲۱۰	۰/۳۱۲	۰/۰۰۰
Si3Ge-a3	۰/۰۸۹	۰/۰۸۹	-۰/۱۴۰	-۰/۰۳۸	۰/۸۹۹
Si3Ge-b1	-۰/۰۱۰	۰/۱۹۶	-۰/۰۹۳	-۰/۰۹۳	۰/۲۶۳
	-۰/۲۷۰	-۰/۱۰۸	۰/۱۸۹	۰/۱۸۹	۰/۱۹۳
Si3Ge-b3	۰/۰۷۶	۰/۲۴۳	-۰/۱۶۰	-۰/۱۶۰	۰/۹۹۰
Si2Ge2-a1	۰/۰۰۴	۰/۱۷۰	-۰/۱۴۰	-۰/۰۳۵	۰/۱۹۷
	-۰/۳۰۵	-۰/۱۴۳	۰/۱۷۲	۰/۲۷۵	۰/۱۵۰
Si2Ge2-a3	۰/۰۶۱	۰/۲۲۶	-۰/۱۹۴	-۰/۰۹۳	۱/۰۲۲
Si2Ge2-b1	-۰/۰۲۲	-۰/۰۲۲	۰/۰۲۲	۰/۰۲۲	۰/۰۰۰
	-۰/۲۹۸	-۰/۲۹۸	۰/۲۹۸	۰/۲۹۸	۰/۰۰۰
Si2Ge2-b3	۰/۰۳۷	۰/۰۳۷	-۰/۰۳۷	-۰/۰۳۷	۱/۰۴۲
Si2Ge2-c1	۰/۱۸۰	۰/۱۸۰	-۰/۱۸۰	-۰/۱۸۰	۰/۵۱۲
	-۰/۱۵۱	-۰/۱۵۱	۰/۱۵۱	۰/۱۵۱	۰/۳۷۶
Si2Ge2-c3	۰/۲۳۱	۰/۲۳۱	-۰/۲۳۱	-۰/۲۳۱	۱/۱۷۵
SiGe3-a1	۰/۱۴۵	۰/۱۴۵	۰/۲۰۴	-۰/۰۸۷	۰/۲۴۷
	-۰/۱۸۶	-۰/۱۸۶	۰/۱۳۵	۰/۲۳۷	۰/۱۸۳
SiGe3-a3	۰/۱۸۲	۰/۱۸۲	-۰/۲۲۷	-۰/۱۳۷	۱/۰۰۵
SiGe3-b1	-۰/۰۷۸	۰/۱۴۷	-۰/۰۳۴	-۰/۰۳۴	۰/۰۰۰
	-۰/۳۴۲	-۰/۱۸۰	۰/۲۶۱	۰/۲۶۱	۰/۰۰۰
SiGe3-b3	-۰/۰۲۶	۰/۰۲۶	-۰/۰۹۰	-۰/۰۹۰	۰/۹۵۵

جدول ۲: دانسیته اسپین روی اتم‌های مختلف

کلاستر	دانسیته مولیکن			
	X	X'	Y	Y'
Ge4-3	۰/۰۲۲۰	۰/۰۲۲۰	۰/۹۷۸۰	۰/۹۷۸۰
Si4-3	۰/۰۳۴۷	۰/۶۳۴۷	۰/۹۶۵۳	۰/۹۶۵۳
Si3Ge-a3	۰/۰۳۹۸	۰/۰۳۹۸	۰/۹۲۷۸	۰/۹۹۲۵
Si3Ge-b3	۰/۰۱۳۷	۰/۰۲۷۲	۰/۹۷۹۵	۰/۹۷۹۵
Si2Ge2-a3	۰/۰۰۷۵	۰/۰۳۷۳	۰/۹۴۳۷	۱/۰۱۱۴
Si2Ge2-b3	۰/۰۴۳۱	۰/۰۴۳۱	۰/۹۵۶۹	۰/۹۵۶۹
Si2Ge2-c3	-۰/۰۰۵۶	-۰/۰۰۵۶	۱/۰۰۵۶	۱/۰۰۵۶
SiGe3-a3	۰/۰۰۸۵	۰/۰۰۸۵	۰/۹۵۱۱	۱/۰۳۱۸
SiGe3-b3	۰/۰۰۹۴	۰/۰۵۵۱	۰/۹۶۷۷	۰/۹۶۷۷

### نتیجه گیری

با استفاده از روش DFT جدید ترهه‌لار (MPW1B95) تمام ساختارهای  $\text{Si}_4\text{Ge}_{4-x}$  ( $x=0-4$ ) مورد بررسی قرار گرفته است. تمام ساختارها از لحاظ فرکانس ارتعاشی مورد بررسی قرار گرفته‌اند تا مطمئن شویم ساختارها واقعاً پایدارند. همان‌طور که محاسبه کرده‌ایم و تجربه هم نشان می‌دهد پیوند Si-Si نسبت به Si-Ge و Ge-Ge پایدارتر است و جالب اینجاست که در تمام این ساختارهای نانو اگر پیوند Si-Si باشد نسبت به اینکه پیوندهای Si-Ge و Ge-Ge باشد شاهد پایداری بیشتری خواهیم بود. نکته بعدی که اهمیت آن در وسیله‌های الکترونی و کامپیوتری مهم است این است که محاسبات ما نشان می‌دهد که هر جا تعداد پیوند کمتری در کلاستر وجود دارد احتمال تجمع اسپین در آنجا بیشتر است و این آلودگی اسپینی می‌تواند نحوه عملکرد دستگاه موردنظر را تحت تأثیر قرار دهد.

### منابع و مراجع

- [1] H.-C. Luan, K. Wada, L.C. Kimerling, G. Masini, L. Colace and G. Assanto, *Opt. Mater.* 17, 71 (2001).
- [2] M. Nahali, F. Gobal, *Mol. Phys.* 108, 1317 (2010).
- [3] I.N. Levine, *Quantum Chemistry* (Prentice-Hall, Inc., New Jersey, 2000).
- [4] Y. Zhao and D.G. Truhlar, *J. Phys. Chem. A.* 108, 6908 (2004).
- [5] P. Wielgus, S. Roszak, D. Majumdar, J. Saloni and J. Leszczynski, *J. Chem. Phys.* 128, 144305 (2008).