



Jahn-Teller效应对晶体硅空位复合活性影响的第一性原理计算研究

钟淑英 周耐根 周浪

南昌大学 太阳能光伏学院

江西师范大学 物理与通信电子学院

E-mail: lzhou@ncu.edu.cn





主要内容

1

杨-泰勒效应概念

2

对比研究有无J-T效应系统的电子结构

3

总结J-T效应对硅空位复合活性的影响





杨-泰勒效应 (Jahn-Teller effect)

Jahn-Teller 在1937年提出，描述了基态时有多个简并态的非线性分子的电子云在某些情形下发生的构型形变。

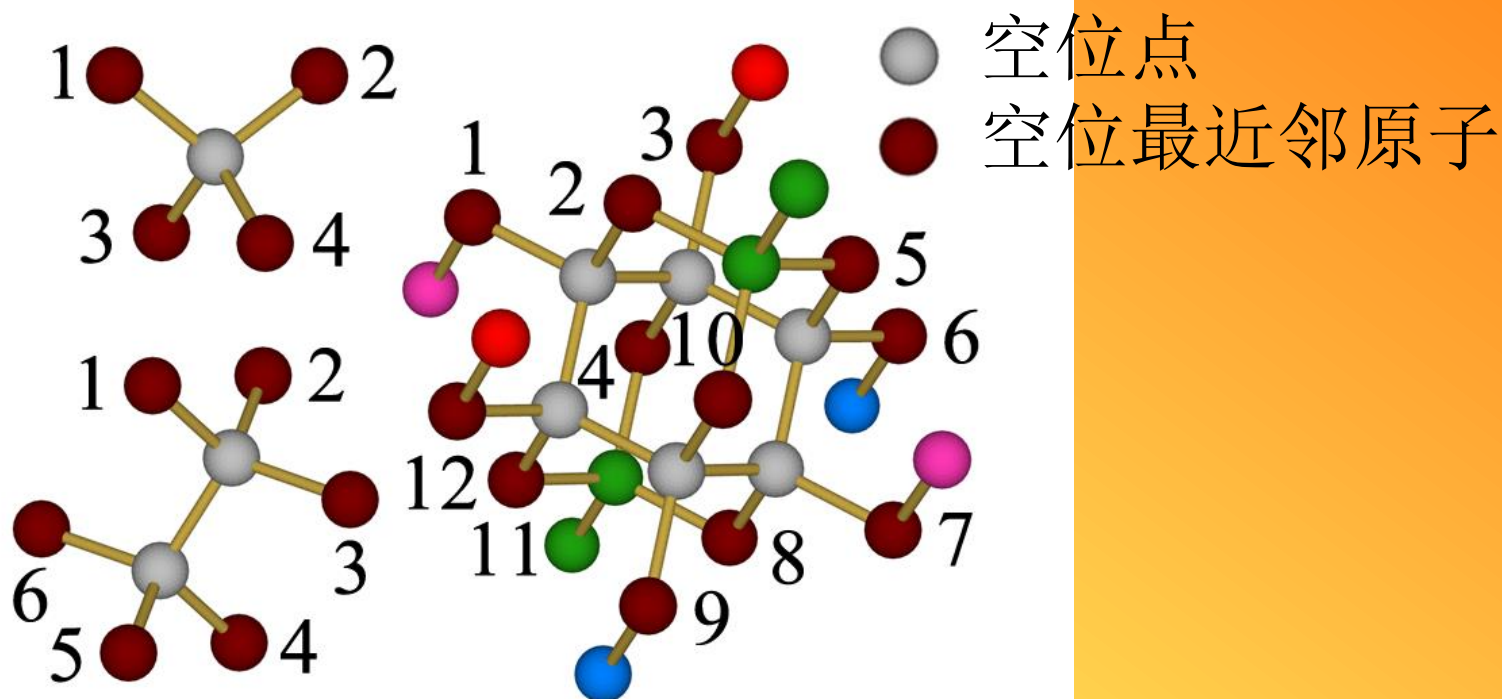
广义的杨-泰勒效应还包括：

- 伦纳-泰勒效应(RTE)，描述线形分子简并态的弯曲变形
- 赝杨-泰勒效应(PJTE)，描述不同电子态之间相互作用导致的变形。





V1（单空位）、V2（双空位）及V6（六边形空位环）的原子结构

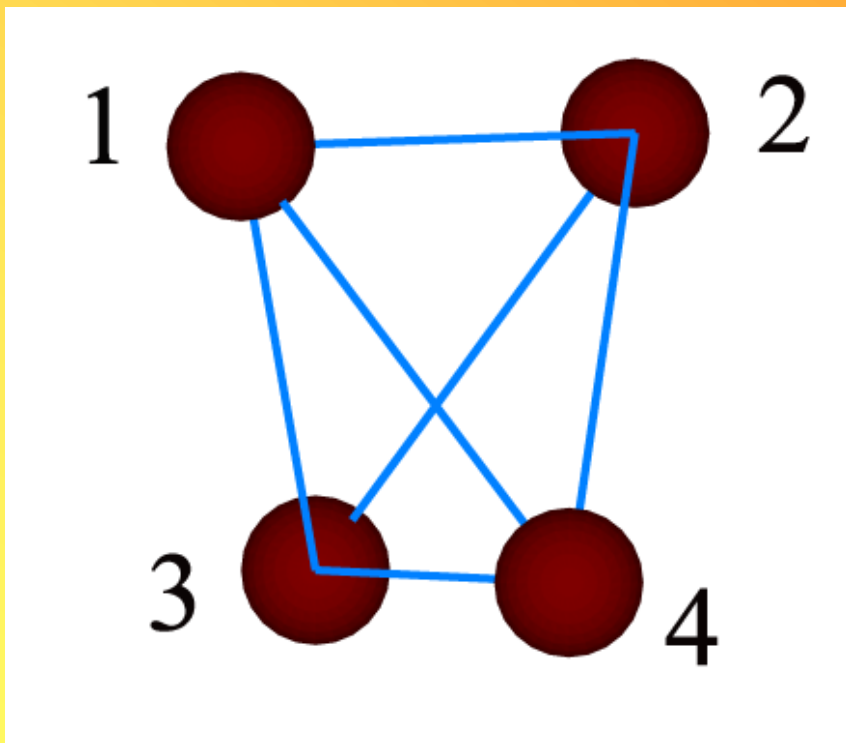




弛豫后结构和能量

缺陷类型 成能 (eV)	形变幅值 (Å)	对称性	形
V1 3. 618	3. 522 (0. 915 (fd)) (4)	D2d	
	3. 026 (0. 786 (fd)) (2)		
V2 (LP) 5. 3688	2. 81 (2) 3. 48 (4)	~C2h	
(RB) 5. 3633	3. 60 (2) 3. 10 (4)	C2h	
V6 9. 123	2. 754 (6)		D3d





Jahn-Teller 效应 (V1)

弛豫前:

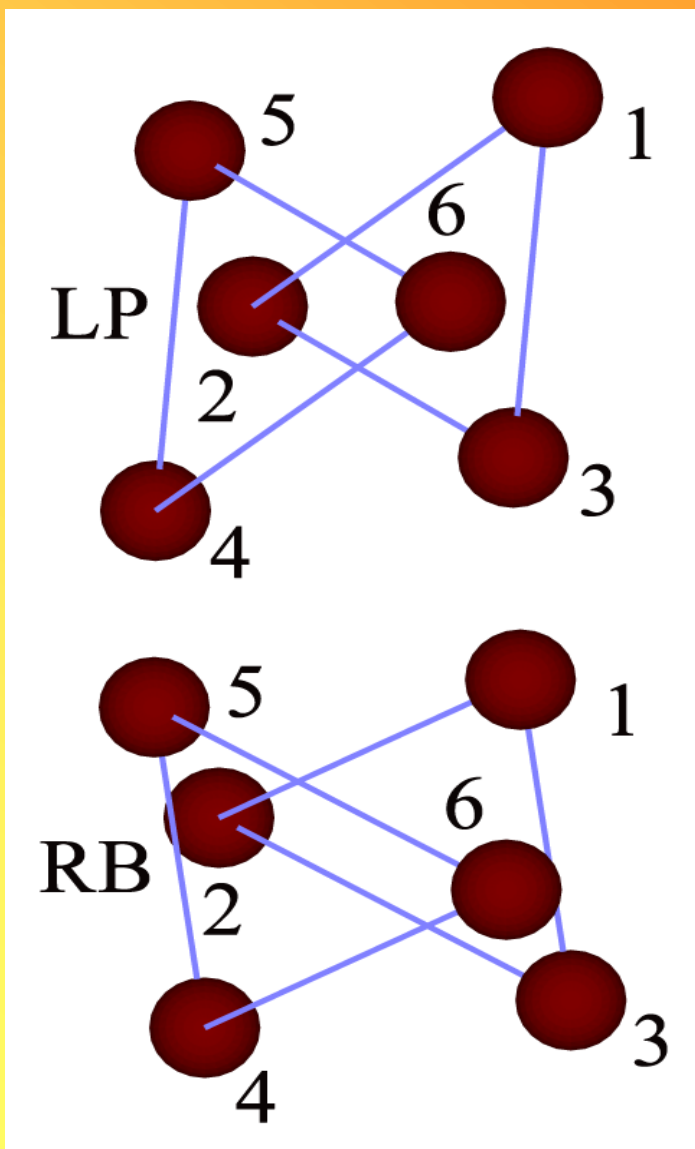
$$d_{12} = d_{34} = d_{13} = d_{14} = d_{23} = d_{24} = 3.84 \text{ \AA}$$

弛豫后:

$$d_{12} = d_{34} = 3.026 \text{ \AA}$$

$$d_{13} = d_{14} = d_{23} = d_{24} = 3.522 \text{ \AA}$$





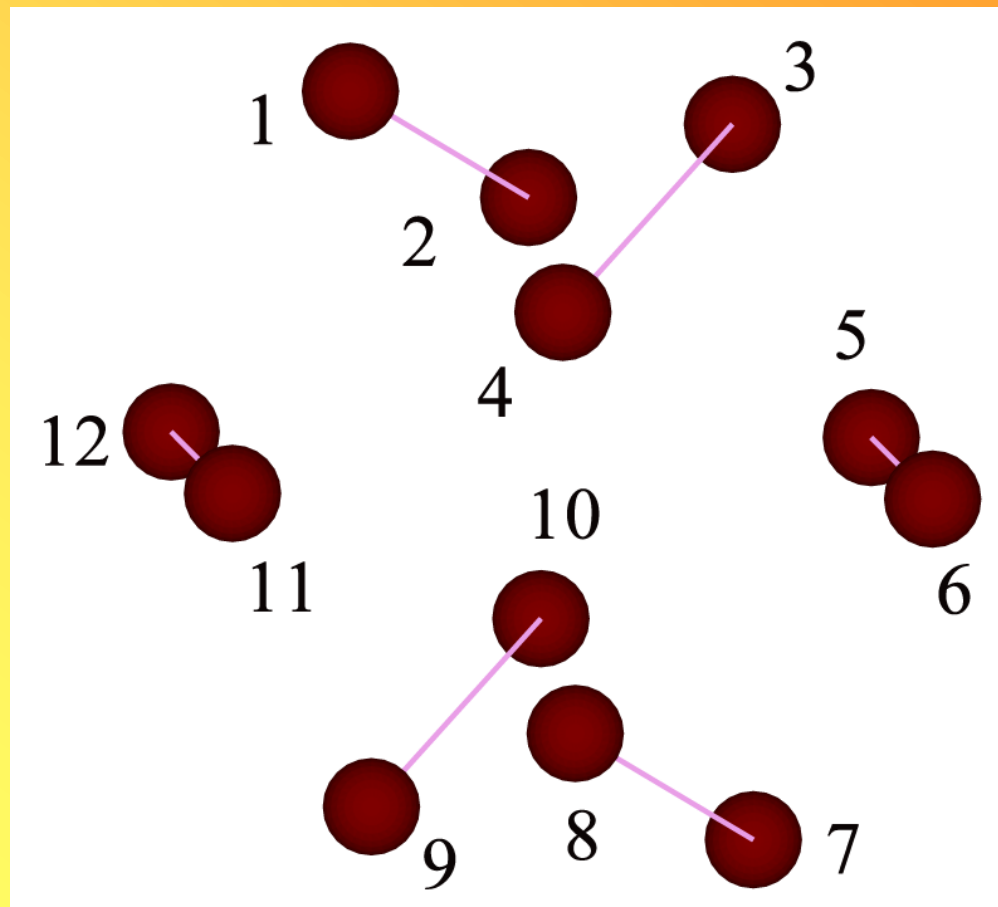
$$d_{12} = d_{13} = d_{45} = d_{46} = 3.48 \text{ \AA}$$

$$d_{23} = d_{56} = 2.81 \text{ \AA}$$

$$d_{12} = d_{13} = d_{45} = d_{46} = 3.10 \text{ \AA}$$

$$d_{23} = d_{56} = 3.60 \text{ \AA}$$

Jahn-Teller 效应 (V2)



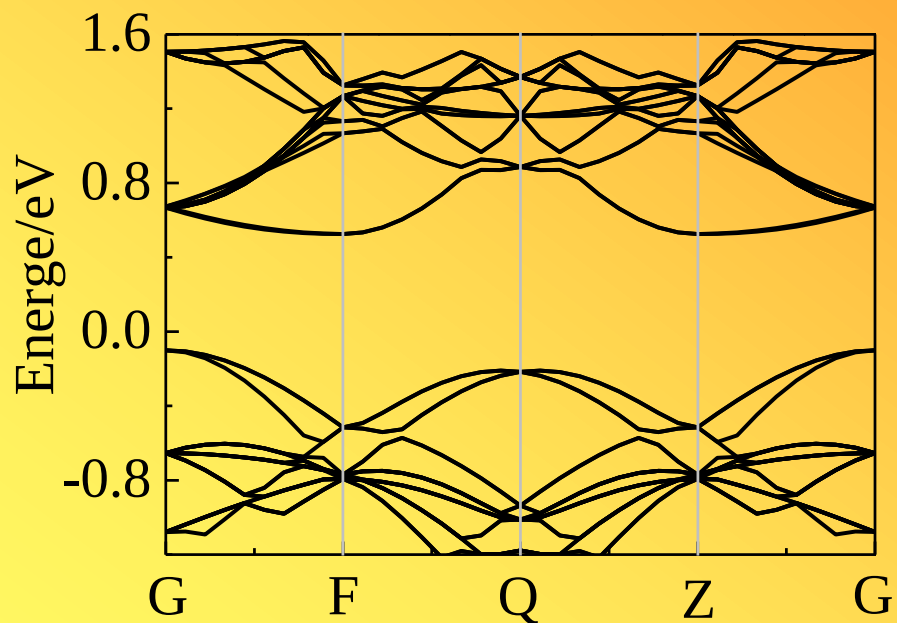
$$\begin{aligned} d_{12} &= d_{34} = d_{56} \\ &= d_{78} = d_{910} = d_{1112} \\ &= 2.754 \text{ \AA} \end{aligned}$$

V6弛豫后结构图

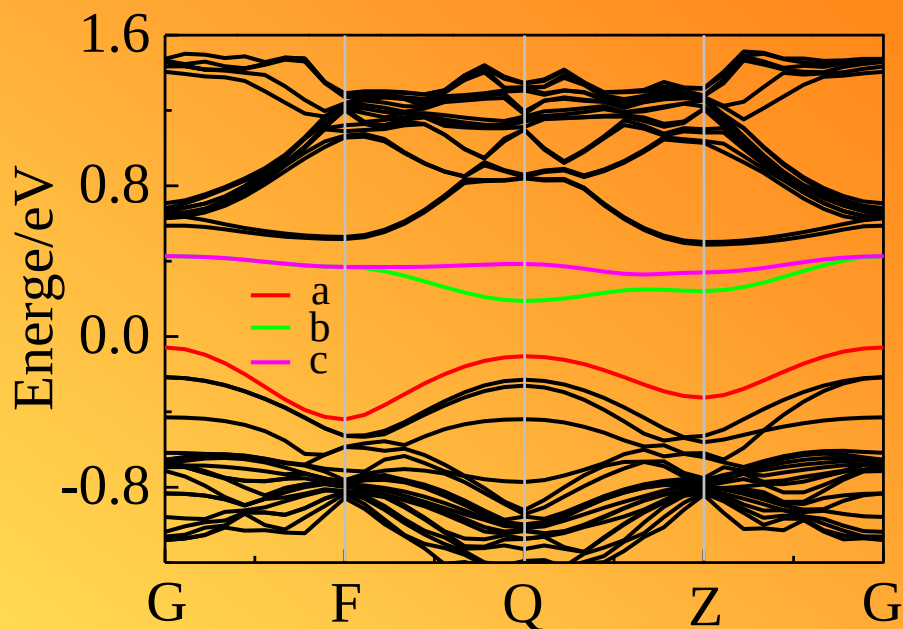




Electronic properties



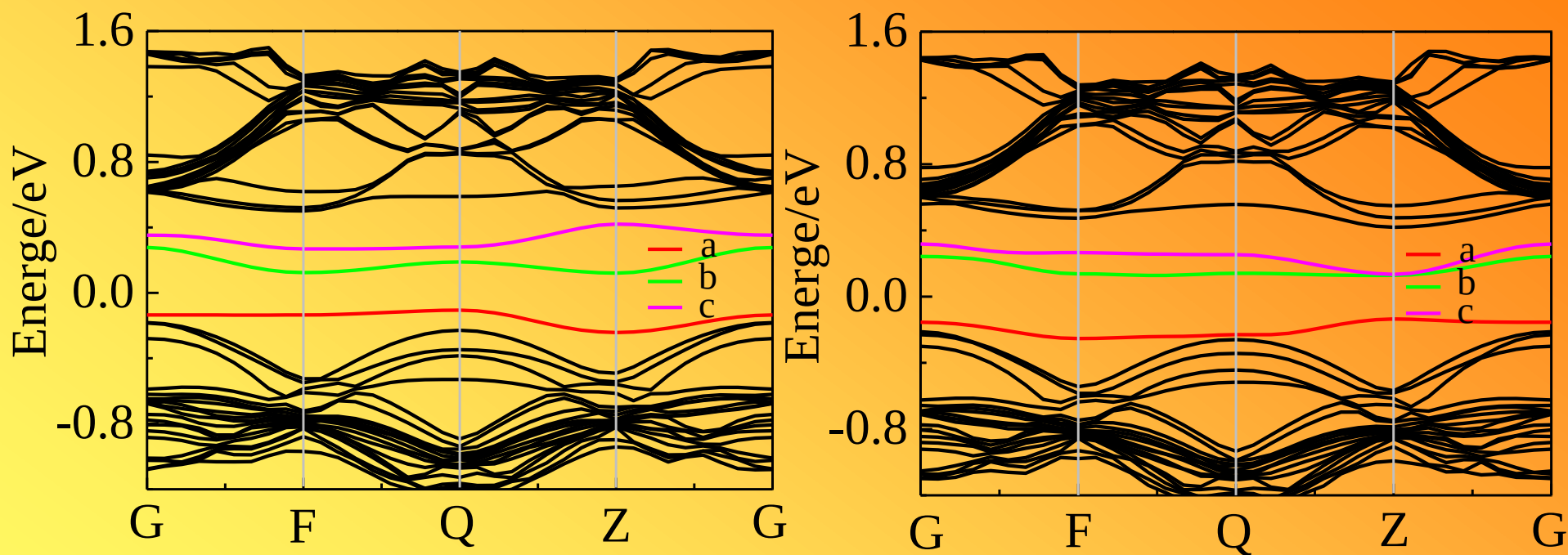
晶体硅能带结构图



V1 能带结构图

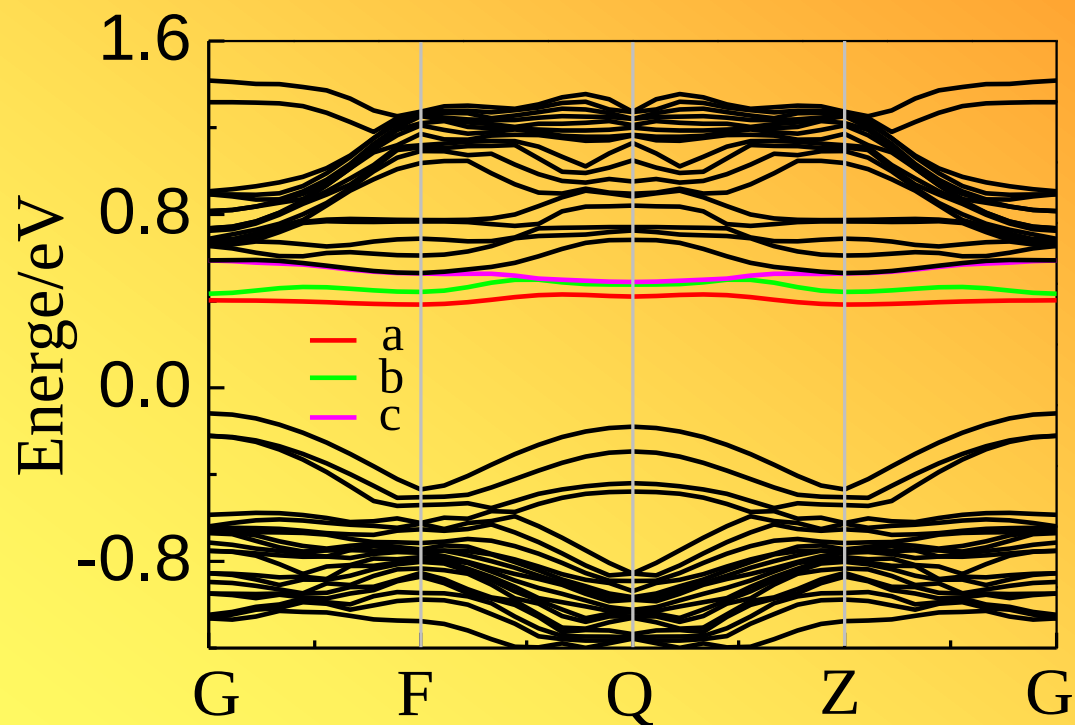
晶体硅带隙值约0.63eV，V1能带中出现间隙带b、c





V2能带结构图

图中Z点，LP构型中两间隙带差值较RB构型中大约0.3eV，表明两种构型具有不同的复合活性。



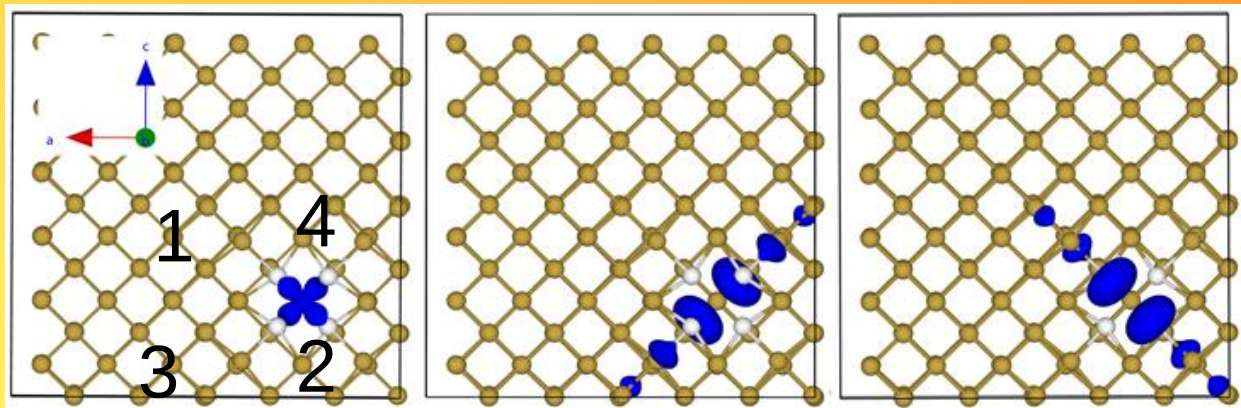
V6能带结构图

结论：V1，V2能带中存在间隙带，增加复合中心，改变电活性；V6出现拖尾带，对电活性影响不大。说明J-T效应对电学性能有较大影响。





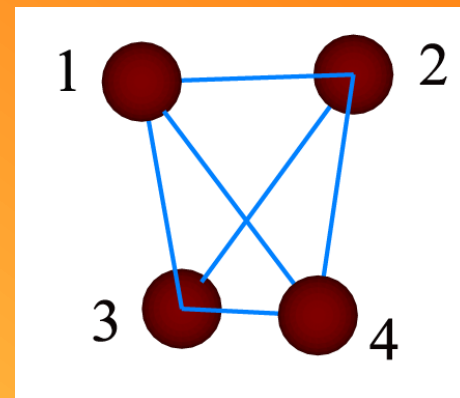
能带分解电荷密度图



(a)

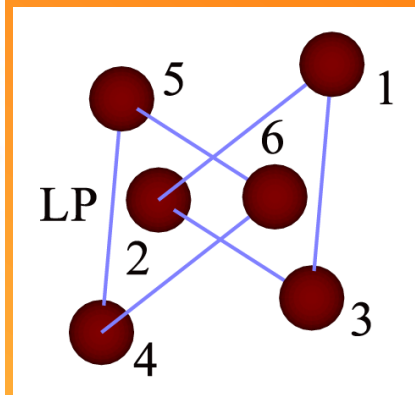
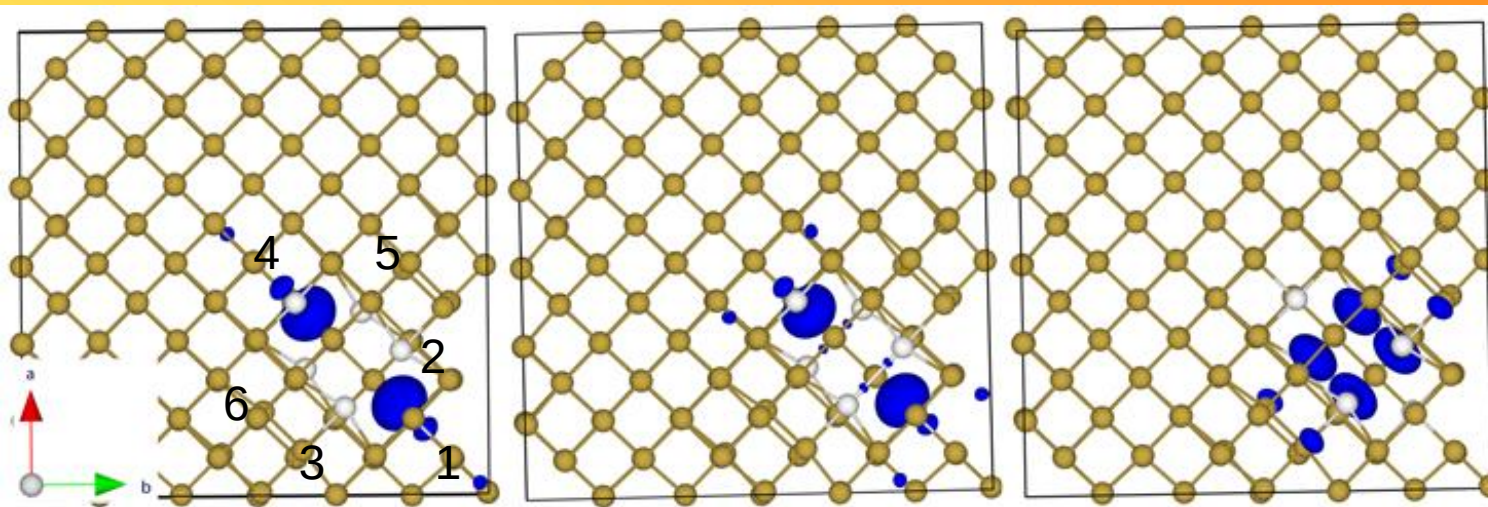
(b)

(c)



特点：a条能带电荷密度主要集中在原子12（ $[101]$ ）之间及34 $[10\bar{1}]$ 之间；b条能带电荷密度主要沿着 $[10\bar{1}]$ 方向，c条能带电荷密度主要分布在 $[101]$ 方向上。





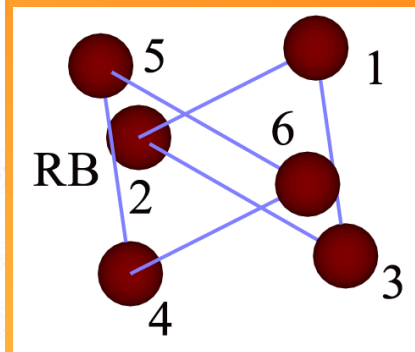
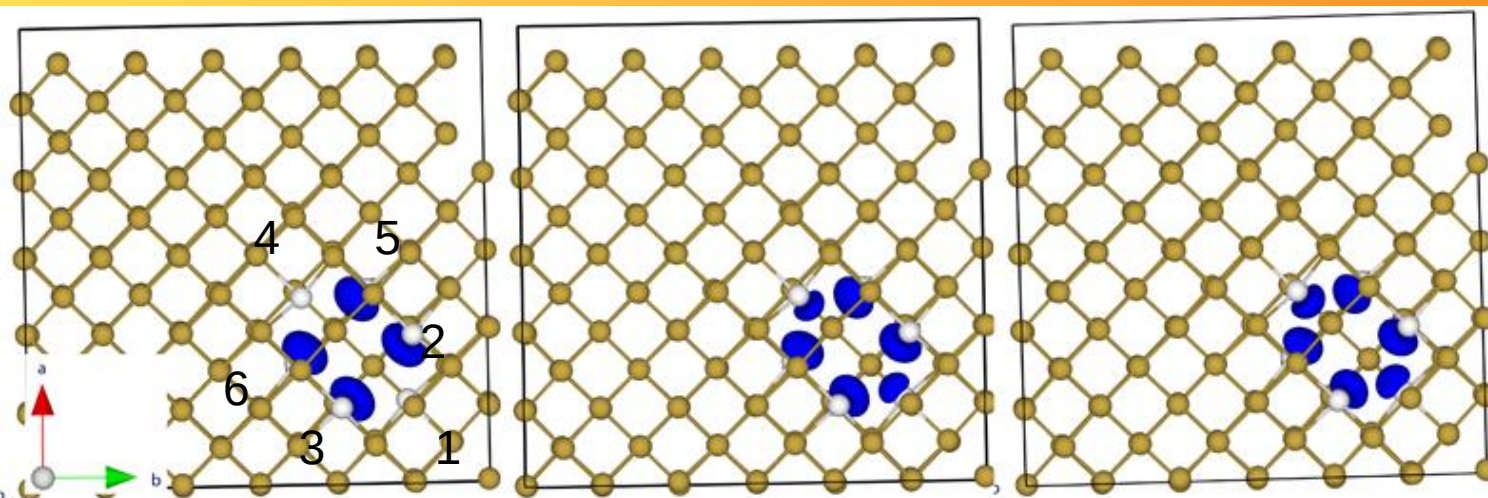
V2(LP) (a)

(b)

(c)

特点：a条能带电荷密度主要分布在原子1、4附近;b条能带电荷密度还在1、4原子附近的第二紧邻还有分布；c条能带电荷密度主要分布在2、3原子及5、6原子所在之字链[110]方向上。





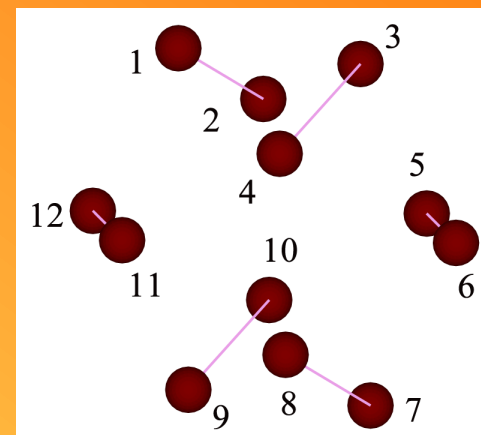
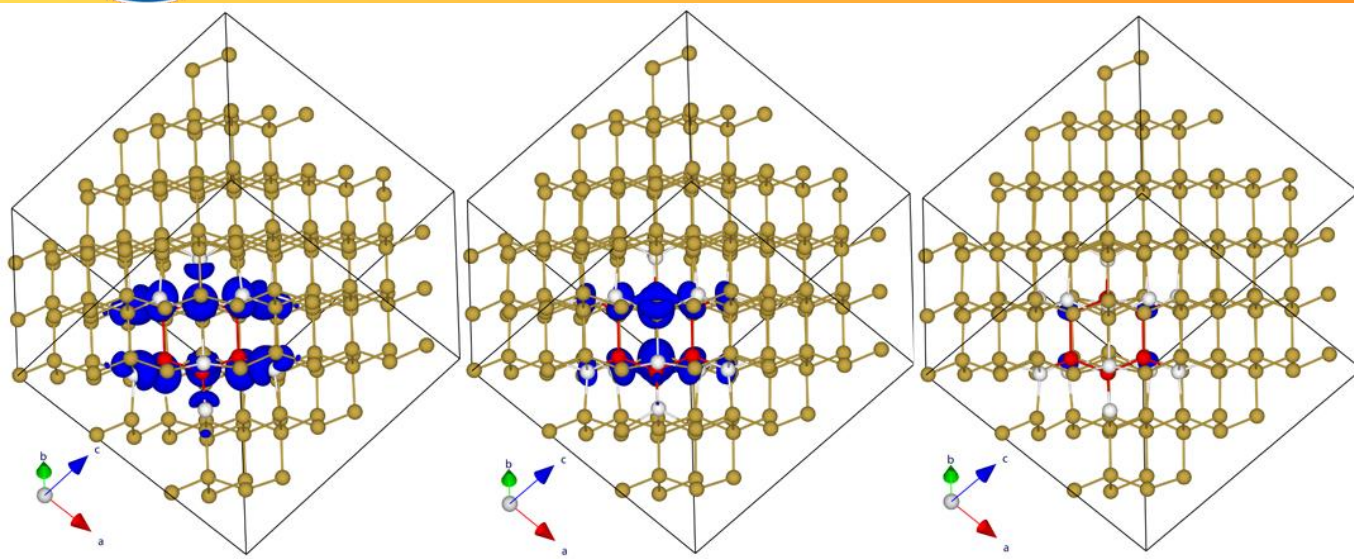
V2(RB) (a)

(b)

(c)

特点：a条能带电荷密度主要分布在非共振原子2、3及5、6附近;b、c能带电荷密度主要分布在空位周围6个最近邻原子附近。





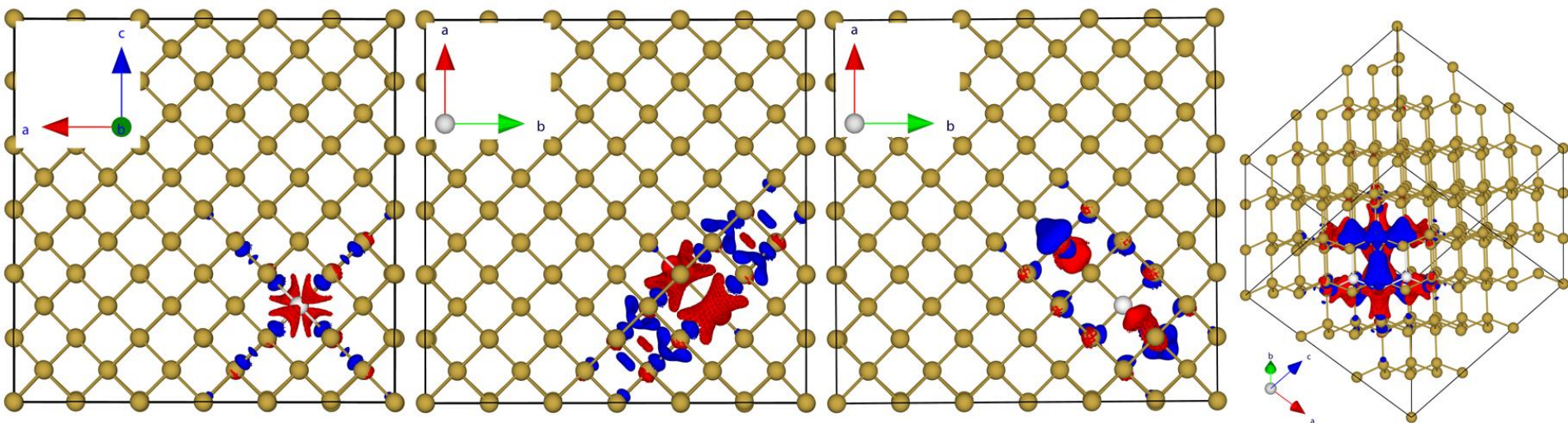
V6 (a) (b) (c)

特点：拖尾带电荷密度主要由缺陷最近邻原子贡献，随着原子距离增大，分解电荷密度衰减很快。





差分电荷密度图



(a) $\nabla\rho$ of V1 (b) $\nabla\rho$ of V2(LP) (c) $\nabla\rho$ of V2(RB) (d) $\nabla\rho$ of V6

◆与能带分解电荷密度分布特性吻合





结 论

- 1、V1、V2 都使能带结构中出现间隙带，这些间隙带主要由缺陷最近邻原子的电荷构成，另外沿着110方向的次近邻原子贡献也较大。J-T效应使间隙带出现分裂，J-T 效应产生的不同形变（LP 和 RB）导致不同的间隙带位置，同时其对应分解电荷密度分布特点也很不相同；
- 2、V6的能带结构中只出现拖尾带，这些拖尾带主要由最近邻原子的电荷贡献，不具有方向性；
- 3、J-T效应增加了晶体硅的复合活性。





谢谢！