

PACS numbers: 61.72.J-, 61.72.U-, 62.20.de, 71.15.Mb, 71.20.Mq, 71.55.Cn, 75.50.Pp

Першопринципне моделювання електронних і пружних властивостей дефектного кремнію

І. В. Плющай¹, Т. В. Горкавенко¹, Т. Л. Цареградська¹, О. І. Плющай²

¹*Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
фізичний факультет,
вул. Володимирська, 64/13,
01601 Київ, Україна*

²*Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,
бульвар Акад. Вернадського, 36,
03142 Київ, Україна*

Проведено першопринципний розрахунок атомарної й електронної структури, а також пружних властивостей надкомірки силіцію з 64 атомів за наявності власних точкових дефектів, основних домішкових атомів (O, C) та легувальних домішок (N, B, P, As, Al, In). Розрахунок проводився методом функціоналу густини в узагальненому градієнтному наближенні за допомогою пакета програм ABINIT. Проаналізовано зміщення атомів Силіцію навколо досліджених точкових дефектів аж до 9 координаційної сфери включно. Обраховано та проаналізовано особливості зміни рівноважного об'єму та коефіцієнта всебічного стиснення надкомірки з 64 атомів Si із різними точковими дефектами. Показано, що деформація структури за рахунок точкових дефектів приводить до зменшення модуля всебічного стиснення для всіх досліджених випадків, крім міжвузловинного Оксигену. Представлено та проаналізовано електронні спектри надкомірок силіцію з різними точковими дефектами. Показано, що наявність власних точкових дефектів, а також Оксигену та Карбону в силіції приводить до появи вузьких домішкових піків в околі рівня Фермі, які у випадку міжвузловинного Оксигену можуть приводити до формування магнетних моментів на домішкових атомах.

The first-principle calculation of the atomic and electronic structures as well as elastic properties of supercell composed of 64 Si atoms with its intrinsic point defects, the main impurity atoms (O, C) and dopants (N, B, P, As, Al, In) is presented. The density functional theory with the general gradient correction using the software package ABINIT is used for numerical calculation. Displacements of silicon atoms around the examined point defects up to 9th coordination sphere inclusive are analysed. The peculiarities of changes in both the equilibrium volume and the bulk modulus of

supercell composed of 64 Si atoms and with various point defects are calculated and analysed. As shown, the structure deformation due to point defects leads to a decrease in the overall compression modulus for all the studied cases except interstitial oxygen. Electron spectra of silicon with various point defects are presented and analysed. As shown, the presence of intrinsic point defects as well as oxygen and carbon in silicon leads to the appearance of narrow impurity peaks in the vicinity of the Fermi level that can lead to the formation of magnetic moments on impurity atoms in the case of interstitial oxygen.

Проведён первопринципный расчёт атомной и электронной структур, а также упругих свойств сверхъядчейки кремния из 64 атомов при наличии собственных точечных дефектов, основных примесных атомов (O, C) и легирующих примесей (N, B, P, As, Al, In). Расчёт проводился методом функционала плотности в обобщённом градиентном приближении с помощью пакета программ ABINIT. Проанализировано смещение атомов кремния вокруг исследованных точечных дефектов до 9 координационной сферы включительно. Рассчитаны и проанализированы особенности изменения равновесного объёма и коэффициента всестороннего сжатия сверхъядчейки из 64 атомов кремния с различными точечными дефектами. Показано, что деформация структуры за счёт точечных дефектов приводит к уменьшению модуля всестороннего сжатия для всех исследованных случаев, кроме междоузельного кислорода. Представлены и проанализированы электронные спектры сверхъядчек кремния с разными точечными дефектами. Показано, что присутствие собственных точечных дефектов, а также кислорода и углерода в кремнии приводит к появлению узких примесных пиков в области уровня Ферми, которые в случае междоузельного кислорода могут привести к формированию магнитных моментов на примесных атомах.

Ключові слова: кремній, точкові дефекти, атомарна структура, електронна структура, модуль всебічного стиснення.

Key words: silicon, point defects, atomic structure, electronic structure, bulk modulus.

Ключевые слова: кремний, точечные дефекты, атомная структура, электронная структура, модуль всестороннего сжатия.

(Отримано 2 квітня 2019 р.)

1. ВСТУП

Відомо, що електричні та механічні властивості напівпровідникових матеріалів значною мірою визначаються їхньою дефектною структурою. Зокрема, точкові дефекти (власні точкові дефекти та домішкові атоми) впливають на механічні, оптичні й електронні характеристики приладів і мають враховуватися вже на етапі

інженерного проектування електронних матеріалів і пристроїв [1, 2].

На даний момент дефекти в кремнії більш широко досліджено з урахуванням їхнього впливу на електронні властивості, ніж на механічні. Однак, з появою все більш чутливих мікроелектромеханічних пристроїв зростає важливість точних знань про механічні властивості компонентних матеріалів, оскільки зміни механічних властивостей можуть порушити функціонування високочутливого пристрою. Таким чином, стає зрозуміло, чому з розвитком обчислювальних метод і розрахункових можливостей увага дослідників періодично повертається до всебічного вивчення стану (атомового, пружного, магнетного, електронного) точкових дефектів кремнію та їхнього впливу на фізичні властивості кремнієвих матеріалів, зокрема на пружні властивості дефектного кремнію.

Нам відомо лише кілька теоретичних робіт з дослідження впливу дефектів на пружні властивості кремнію, в основі яких лежить метода молекулярної динаміки [2–4]. Оскільки результати розрахунків даною методикою істотно залежать від вибору потенціалу взаємодії, висновки щодо впливу дефектів на пружні властивості кремнію в даних роботах виявилися дещо суперечливими. Так, автори роботи [3] зробили висновок, що і вакансії, і міжвузловинні атоми збільшують пружні константи кремнію. На противагу цьому, в роботі [4] було показано, що дефекти всіх типів, як ізольовані точкові дефекти (вакансії та втілені домішкові атоми), так і комплекси дефектів, викликають зменшення модуля Юнга кремнію, а пружні константи змінюються залежно від концентрації дефектів майже лінійно за концентрацій дефектів до 0,3%.

Саме тому метою даної роботи було встановити особливості електронних спектрів та атомного стану власних точкових дефектів (вакансій та міжвузловинних атомів), домішкових атомів Оксигену та Карбону, які є домінуючими точковими дефектами в монокристалах кремнію, а також основних легувальних домішок (N, B, P, As, Al, In) та проаналізувати їхній вплив на пружні властивості дефектного кремнію.

2. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКІВ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Для з'ясування електронного та кристалічного стану кремнію з точковими дефектами (власними дефектами, домішковими атомами Оксигену і Карбону та основних легувальних домішок) нами було проведено моделювання стану електронної підсистеми надкомірки кремнію з 64 атомів методом функціоналу густини в узагальненому ґradientному наближенні [5] за допомогою пакета

програм АВІНІТ [6]. Домішки Оксигену та Карбону розглядалися в стані втілення у тетраедричній порі. Домішки, які звичайно використовуються для легування кремнію (N, B, P, As, Al, In), розглядалися в стані заміщення. Розміри надкомірки становили приблизно $1,3 \text{ нм}^3$; отже, відповідна концентрація домішок була $\cong 7 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$.

Для кожної надкомірки був проведений «числовий відпал» положень атомів Силіцію навколо точкового дефекту, тобто було розраховано деформацію кристалічної ґратниці навколо домішки. Положення атомів Силіцію навколо точкового дефекту змінювались у відповідності з силами, розрахованими з перших принципів. Алгоритм «числового відпалу» було детально описано в [7].

На рисунку 1 представлено вигляд надкомірки Si_{64}O , яка містить 64 атоми Si та втілений атом Оксигену в тетраедричній порі вздовж напрямків $\langle 100 \rangle$ і $\langle 110 \rangle$. Вздовж напрямку $\langle 110 \rangle$ атоми діамантоподібної ґратниці кремнію утворюють канали діаметром приблизно у 0,3 нм, які, зокрема, використовуються для імплантації різноманітних йонів глибоко в мішень Si. Представлено вигляд надкомірки вже після «числового відпалу» положень атомів; отже, на рис. 1 можна спостерігати невеличкі зміщення атомів Силіцію навколо втіленого атома Оксигену. Так, атоми Силіцію першої координаційної сфери навколо міжвузловинного O зміщуються до домішкового атома на 6,2% (рис. 1); а атоми Si з другої та третьої координаційних сфер, навпаки, зміщуються від домішкового атома на 3,1% та 0,9% відповідно. Зміщення атомів наступних координаційних сфер (всього наша надкомірка містить атоми до 9 координаційної сфери включно) є незначними і згасають по мірі віддалення від домішкового атома. Виграш енергії електронної підсистеми надкомірки за рахунок релаксації атомових позицій навколо втіленого Оксигену становить $0,2 \text{ eV}$ ($7 \cdot 10^{-3}$ гартрі).

Для втіленого атома Карбону також спостерігається зменшення віддалей між атомами Силіцію, що формують відповідну тетраедричну пору, але на меншу величину — приблизно на 3,9%. Якщо ж у тетраедричну пору втілити додатковий атом Силіцію, то, навпаки, спостерігається збільшення лінійних розмірів цієї пори приблизно на 5%.

Для визначення механічних характеристик надкомірки кремнію із точковими дефектами (власними дефектами, Оксигеном і Карбоном) нами було проведено систематичні розрахунки стану електронної підсистеми надкомірок кремнію з точковими дефектами (Si_{64}O — із втіленим атомом Оксигену, $\text{Si}_{63}\text{V}_{ac}$ — із вакансією, Si_{64}C — із втіленим атомом Карбону, Si_{64}Si — із міжвузловинним атомом Силіцію) при ізотропному стисненні та розтягненні їх. Як видно з рис. 2, розрахований з перших принципів тиск при цьому

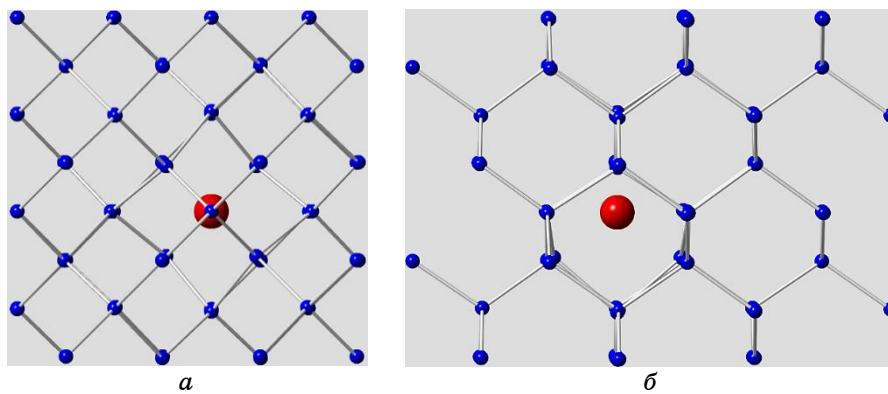


Рис. 1. Надкомірка з 64 атомів Si (маленькі кульки) із втіленим у тетраедричну пору Оксигеном (велика кулька); вигляд вздовж напрямків $\langle 100 \rangle$ (а) та $\langle 110 \rangle$ (б).¹

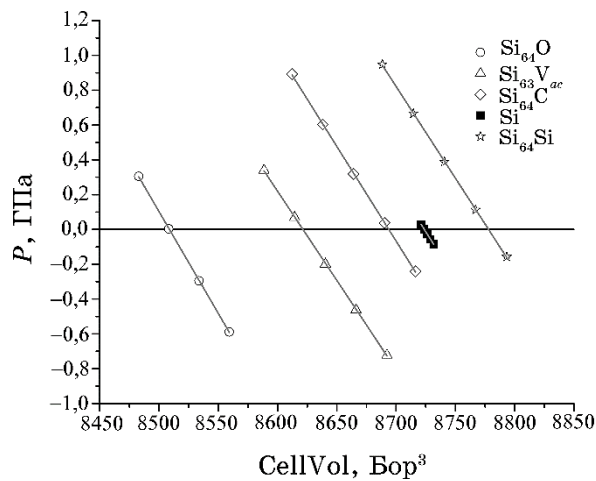


Рис. 2. Зміна тиску при всебічному стиску/розтягу надкомірок кремнію з точковими дефектами (Si₆₄O — із втіленим атомом Оксигену, Si₆₃V_{ac} — із вакансією, Si₆₄C — із втіленим атомом Карбону, Si₆₄Si — міжвузловинним атомом Силіцію) та кристалічного Si.²

змінюється лінійно, що дає можливість визначити модуль всебічного стиснення за формулою $B = -V(dP/dV)$. За лінійною апроксимацією залежності тиску від об'єму надкомірки (рис. 2) було одержано значення рівноважного об'єму надкомірок і модуля всебічного стиснення B , яких представлено в табл. 1.

Слід зазначити, що одержаний нами за результатами першопринципних розрахунків коефіцієнт всебічного стиснення для

ТАБЛИЦЯ 1. Рівноважний об'єм V_{cell} і модуль всебічного стиснення B надкомірок кремнію з точковими дефектами (Si_{64}O — із втіленим атомом Оксигену, $\text{Si}_{63}\text{V}_{ac}$ — із вакансією, Si_{64}C — із втіленим атомом Карбону, Si_{64}Si — із міжвузловинним атомом Силіцію) та кристалічного Si .³

Склад надкомірки	$V_{\text{cell}}(P=0)$, Бор ³	$B \pm \Delta B$, ГПа
Si_{64}O	8508	$99,5 \pm 0,5$
$\text{Si}_{63}\text{V}_{ac}$	8621	$88,4 \pm 0,5$
Si_{64}C	8693	$94,6 \pm 0,5$
Si	8723	$95,0 \pm 0,1$
Si_{64}Si	8777	$92,5 \pm 0,5$

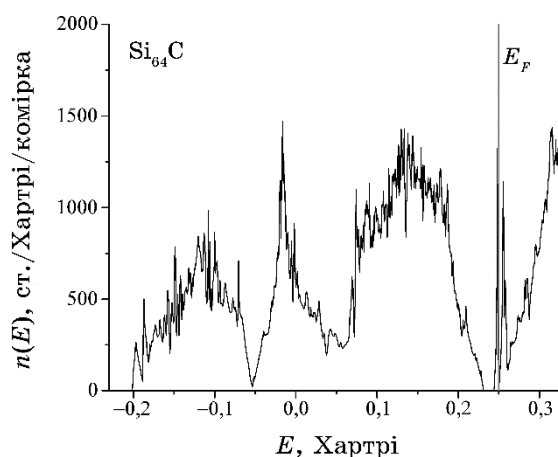


Рис. 3. Енергетична залежність густини електронних станів надкомірки із 64 атомів Силіцію, що містить міжвузловинний атом Карбону у тетраедричній порі.⁴

кристалічного кремнію становить $95,0$ ГПа і є дещо меншим від експериментально визначеного значення $97,6$ ГПа [8]. Дану різницю можна пояснити тим, що наш числовий експеримент проводився без врахування впливу температурних чинників.

Як видно з табл. 1, втілені (у тетраедричну пору) атоми С та Si несильно впливають на рівноважний об'єм надкомірки та на коефіцієнт всебічного стиснення. Ми пояснюємо цей факт наявністю у діамантоподібній структурі кремнію пор (каналів), які можуть вмістити вищезазначені атоми без значних деформацій структури (рис. 1, б), але із зміною електронних спектрів.

На рисунках 3 та 4 представлено енергетичну залежність густини електронних станів надкомірок із 64 атомів Si, що містять міжвузловинний атом Карбону або Силіцію у тетраедричній порі. Рівень Фермі тут і далі позначено вертикальною лінією. Видно,

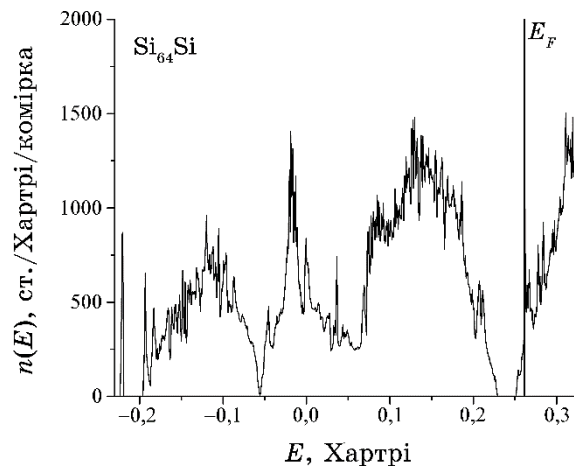


Рис. 4. Енергетична залежність густини електронних станів надкомірки із 64 атомів Силіцію, що містить міжвузловинний атом Силіцію у тетраедричній порі.⁵

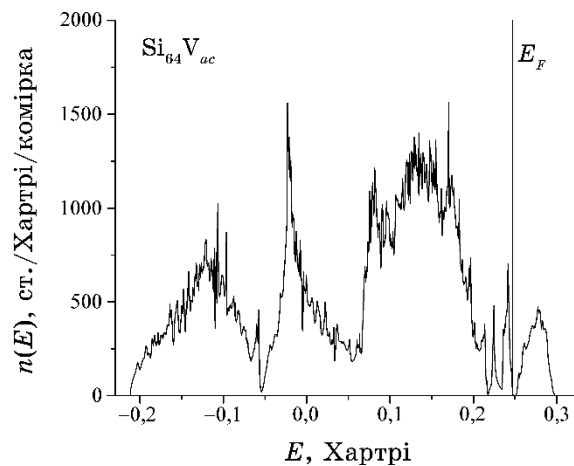


Рис. 5. Енергетична залежність густини електронних станів надкомірки із 64 атомів Силіцію, що містить вакансію.⁶

що втілені у тетраедричну пору домішкові атоми С або атоми Si не приводять до значної перебудови електронних спектрів в цілому, а лише до формування вузьких домішкових піків біля дна зони провідності із потраплянням рівня Фермі в цю область, що добре узгоджується з одержаними раніше даними [9, 10].

Наявність вакансії в складі надкомірки закономірно зменшує як рівноважний об'єм надкомірки, так і коефіцієнт всебічного стиснення (табл. 1). Останнє, на нашу думку, відбувається за ра-

хунок деякого «ослаблення» ковалентної структури — вилучення кількох ковалентних зв'язків. Також спостерігається значна зміна електронних спектрів із появою серії додаткових піків в області забороненої зони (рис. 5). Оскільки попередньо проводився «числовий відпал» положень атомів надкомірки із вакансією, то цілком закономірно, що рівень Фермі потрапляє в область мінімуму електронної густини, що відповідає зменшенню енергії електронної підсистеми.

Цікаву поведінку демонструє надкомірка, що містить втілений атом Оксигену (табл. 1). Рівноважний об'єм такої надкомірки виявився навіть меншим, ніж для надкомірки із вакансією, в той час як коефіцієнт всебічного стиснення помітно вищий, ніж у всіх інших досліджених випадках. Оскільки дослідження коливних мод [11] показують, що втілений Оксиген у кремнії формує псевдомолекулу Si–O–Si, то ми пов'язуємо таку «незвичайну» поведінку із формуванням додаткових ковалентних зв'язків, що «стабілізують» структуру.

На рисунку 6 представлено енергетичну залежність густини електронних станів $n(E)$ надкомірки Si з 64 атомів, що містить один міжвузловинний атом O у тетраедричній порі. В цілому, одержаний електронний спектр відповідає спектру чистого Si. Єдиною якісною відмінністю є формування вузького додаткового піка в забороненій зоні безпосередньо над валентною зоною. Принциповим є те, що домішкова підзона електронних станів O в міжвузловинному стані є дуже вузькою (пласкою) та частково заповненою. Останнє може приводити до виникнення зонного магнетизму, як це відбувається в графітових структурах [12]. Виходячи зі Стонерового критерію [13], магнетні моменти можуть формуватися тоді, коли є частково заповненою вузька домішкова зона (асоціюється з обірваними зв'язками). Таким чином, проведені розрахунки електронних спектрів свідчать про можливість формування магнетних моментів на втілених у тетраедричну пору в кремнії домішкових атомах Оксигену [9, 10].

Також нами було проведено систематичні першопринципні розрахунки стану електронної підсистеми надкомірок із 64 атомів Силіцію з типовими легувальними домішками (N, B, P, As, Al, In), що використовуються для формування напівпровідників *n*- та *p*-типу на основі кремнію. Домішки при цьому знаходилися в положенні заміщення і концентрація їх, таким чином, становила приблизно 1,5% ($7 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$), що звичайно дещо вище типових значень навіть для сильнолегованих напівпровідників, і слід очікувати, що при такій високій концентрації домішок напівпровідник буде виродженим.

Як видно з рис. 7, розрахований з перших принципів тиск при ізотропному стиску та розтягу надкомірок Si_{63}A (де A — легува-

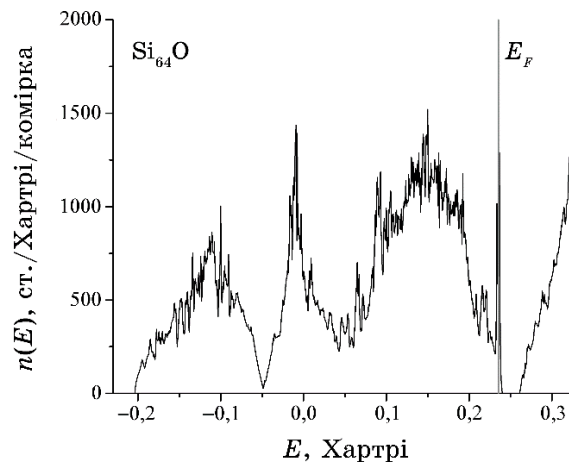


Рис. 6. Енергетична залежність густини електронних станів надкомірки із 64 атомів Силіцію, що містить міжвузловинний атом Оксигену у тетраедричній порі.⁷

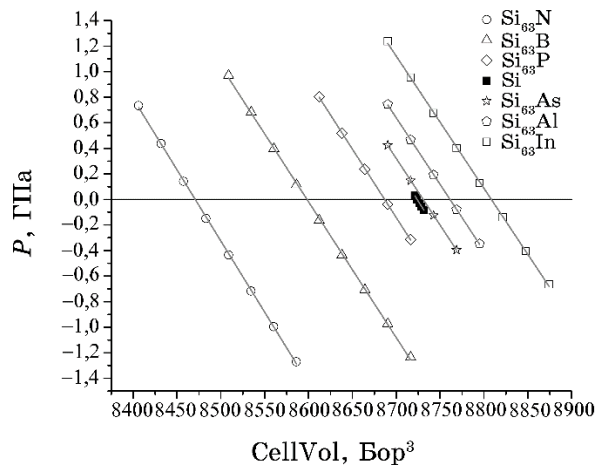


Рис. 7. Зміна тиску при всебічному стиску/розтягу надкомірок кремнію з точковими дефектами заміщення $Si_{63}A$ (де A — N, B, P, As, Al або In) та кристалічного Si.⁸

льна домішка) змінюється лінійно, що дає можливість визначити модуль всебічного стиснення. В таблиці 2 представлено значення рівноважного об'єму V_{cell} надкомірок кремнію з різними легувальними домішками та модуля всебічного стиснення B , одержані за лінійною апроксимацією залежності (рис. 7) тиску від об'єму надкомірок.

Проведене нами першопринципне моделювання показало, що

рівноважний об'єм надкомірок $\text{Si}_{63}A$ (де A — легувальна домішка) закономірно збільшується зі збільшенням ковалентного радіуса легувальної домішки. Ковалентні радіуси легувальних атомів і атома Силіцію, що відповідають триплетному зв'язку [14], також представлено в табл. 2.

Детальна аналіза змін розташування атомів навколо легувальної домішки, одержаних з перших принципів, показала, що, наприклад, міжатомова віддаль «легувальний атом B –найближчий атом Si » приблизно на 11% менша, ніж міжатомова віддаль Si – Si у надкомірці $\text{Si}_{63}B$. Віддаль до других сусідів легувальної домішки Бору зменшується після «числового відпалу» всього на 2%. Відповідно, для легувальної домішки із найбільшим ковалентним радіусом, навпаки, спостерігається міжатомова віддаль In – Si , більша

ТАБЛИЦЯ 2. Ковалентний радіус, рівноважний об'єм V_{cell} і модуль всебічного стиснення B надкомірок кремнію $\text{Si}_{63}A$ з точковими дефектами заміщення (де A — N, B, P, As, Al, In) та кристалічного Si .⁹

Склад надкомірки	Дефект заміщення	R_{cov} , Бор	$V_{\text{cell}}(P=0)$, Бор ³	Тип	$B \pm \Delta B$, ГПа
Si_{63}N	N	1,02	8470	n	$94,4 \pm 0,6$
Si_{63}B	B	1,37	8598	p	$91,4 \pm 0,6$
Si_{63}P	P	1,77	8686	n	$93,1 \pm 0,5$
Si	Si	1,92	8723	—	$95,0 \pm 0,1$
Si_{63}As	As	2,00	8730	n	$91,1 \pm 0,4$
Si_{63}Al	Al	2,09	8761	p	$91,2 \pm 0,4$
Si_{63}In	In	2,75	8808	p	$91,1 \pm 0,5$

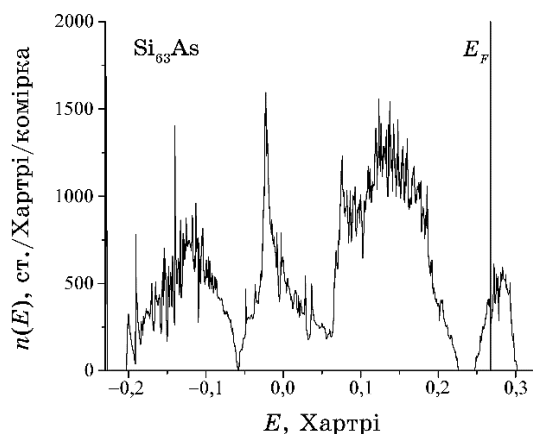


Рис. 8. Енергетична залежність густини електронних станів надкомірки Si_{63}As із легувальним атомом As у стані заміщення.¹⁰

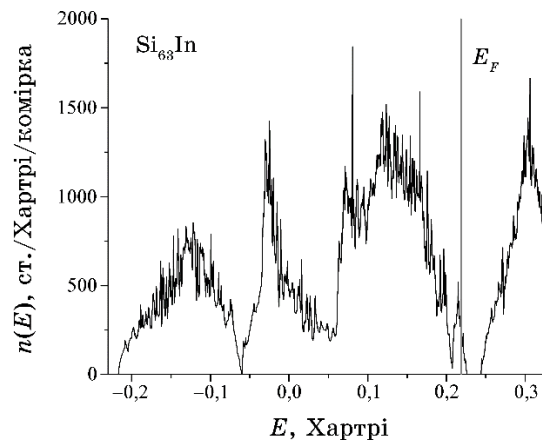


Рис. 9. Енергетична залежність густини електронних станів надкомірки Si_{63}In із легувальним атомом In у стані заміщення.¹¹

приблизно на 8% у порівнянні із міжатомовою віддаллю Si–Si після «числового відпалу» надкомірки Si_{63}In .

Як видно з табл. 2, заміна одного атома Силіцію надкомірки Si_{64} на легувальну домішку приводить до зменшення модуля всебічного стиснення. Ми пояснюємо цей факт тим, що навіть відносно невелика деформація діамантоподібної структури кремнію приводить до зменшення ступеня перекриття гібридизованих орбіталей, що формують ковалентний зв'язок, а отже, до зменшення «жорсткості каркасу» атомарної структури. Особливо яскраво це проявляється для напівпровідників *p*-типу, коли додавання тривалентної домішки вилучає один із ковалентних в'язків, що закономірно зменшує модуль всебічного стиснення, подібно до того, як це спостерігається для надкомірки із вакансією.

Одержані нами електронні спектри для надкомірок $\text{Si}_{63}A$ (де *A* — легувальна домішка), як це й очікувалось, є типовими для вироджених напівпровідників. Як приклад типового електронного спектру виродженого напівпровідника *n*-типу, на рис. 8 представлено спектер надкомірки Si_{63}As , а приклад виродженого напівпровідника *p*-типу — електронний спектер надкомірки Si_{63}In (рис. 9). Спостерігається розташування рівня Фермі (позначеного вертикальною лінією) безпосередньо над дном зони провідності для напівпровідників *n*-типу та під вершиною валентної зони для напівпровідників *p*-типу.

3. ВИСНОВКИ

Проведений «числовий відпал» внутрішніх напружень навколо

домішкових атомів (міжвузловинних Силіцію, Оксигену та Карбону, а також основних легувальних домішок) у кремнії показав, що фактично спостерігаються зміщення положень атомів Силіцію тільки першої координаційної сфери навколо домішкового атома й не більше, ніж на 11%.

В ході проведених першопринципних розрахунків встановлено, як змінюються електронні спектри, рівноважний об'єм і коефіцієнт всебічного стиснення надкомірки з 64 атомів Si із різними точковими дефектами. Так, міжвузловинні атоми C та Si (у тетраедричній порі) не сильно впливають на рівноважний об'єм і на коефіцієнт всебічного стиснення надкомірки Si, оскільки діамантоподібна структура кремнію містить пори (канали), які можуть вмістити вищезазначені атоми без значних деформацій структури. Наявність незначної деформації атомарної структури зменшує ступінь перекриття електронних орбіталей і приводить до незначного зменшення коефіцієнта всебічного стиснення. Наявність вакансії у складі надкомірки Si закономірно зменшує як рівноважний об'єм надкомірки, так і коефіцієнт всебічного стиснення, що може бути пояснено вилученням деяких зав'язків ковалентної структури. Протилежний ефект створює міжвузловинний атом O (у тетраедричній порі), який приводить до зменшення рівноважного об'єму надкомірки Si та до значного зростання коефіцієнта всебічного стиснення, що може бути пояснено формуванням псевдомолекули Si–O–Si.

Також показано, що рівноважний об'єм надкомірок $Si_{63}A$ (де A — легувальна домішка) закономірно збільшується зі збільшенням ковалентного радіуса легувальної домішки. Наявність легувальних домішок у надкомірці Si_{64} приводить до зменшення модуля всебічного стиснення, що також можна пояснити зменшенням «жорсткості каркасу» ковалентної діамантоподібної структури кремнію через деформацію.

Проведене першопринципне моделювання електронних спектрів точкових дефектів (власних дефектів, Оксигену та Карбону) в кремнії виявило появу вузьких домішкових піків, які у випадку міжвузловинного Оксигену можуть приводити до формування магнетних моментів на домішкових атомах. В той же час електронні спектри надкомірок $Si_{63}A$ (де A — легувальна домішка) при даній концентрації легувальних домішок є типовими для вроджених напівпровідників.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА—REFERENCES

1. J. Slotte, M. Rummukainen, and F. Tuomisto, *Phys. Rev. B*, **78**: 085202 (2008); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.085202>.
2. L. A. Marqués, L. Pelaz, I. Santos, P. Lypez, and M. Aboy, *Phys. Rev. B*, **78**:

- 193201 (2008); DOI: 10.1103/PhysRevB.78.193201.
3. S. J. Clark and G. J. Ackland, *Phys. Rev. B*, **48**: 10899 (1993); DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.48.10899>.
 4. C. L. Allred, X. Yuan, M. Z. Bazant, and L. W. Hobbs, *Phys. Rev. B*, **70**: 134113 (2004); DOI: 10.1103/PhysRevB.70.134113.
 5. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.*, **77**: 3865 (1996); DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>.
 6. X. Gonze, B. Amadon, P.-M. Anglade, J.-M. Beuken, F. Bottin, P. Boulanger, F. Bruneval, D. Caliste, R. Caracas, M. Côté, T. Deutsch, L. Genovese, Ph. Ghosez, M. Giantomassi, S. Goedecker, D. R. Hamann, P. Hermet, F. Jollet, G. Jomard, S. Leroux, M. Mancini, S. Mazevet, M. J. T. Oliveira, G. Onida, Y. Pouillon, T. Rangel, G.-M. Rignanese, D. Sangalli, R. Shaltaf, M. Torrent, M. J. Verstraete, G. Zerah, and J. W. Zwanziger, *Computer Phys. Comm.*, **180**, Iss. 12: 2582 (2009); DOI: 10.1016/j.cpc.2009.07.007.
 7. I. V. Plyushchay, T. L. Tsaregrads'ka, O. O. Kalenyk, and O. I. Plyushchay, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **38**, No. 9: 1233 (2016) (in Ukrainian); DOI: 10.15407/mfint.38.09.1233.
 8. M. A. Hopcroft, W. D. Nix, and T. W. Kenny, *J. of Microelectromechanical Systems*, **19**: 229 (2010); DOI: 10.1109/JMEMS.2009.2039697.
 9. T. V. Gorkavenko, I. V. Plyushchay, O. I. Plyushchay, and V. A. Makara, *Journal of Nano- and Electronic Physics*, **9**: 04025 (2017); DOI: 10.21272/jnep.9(4).0402.
 10. T. V. Gorkavenko, I. V. Plyushchay, O. I. Plyushchay, and V. A. Makara, *Journal of Nano- and Electronic Physics*, **10**: 04030 (2018); DOI: 10.21272/jnep.10(4).04030.
 11. *Semiconductors and Semimetals* (Eds. R. K. Willardson, E. R. Weber, and A. C. Beer). Vol. 42. *Oxygen in Silicon* (Ed. F. Shimura) (Academic Press: 1994).
 12. T. L. Makarova, *Fizika i Tekhnika Poluprovodnikov*, **38**, No. 6: 641 (2004) (in Russian).
 13. Ru-Fen Liu and Ching Cheng, *Phys. Rev. B*, **76**: 014405 (2007); DOI: 10.1103/PhysRevB.76.014405.
 14. P. Pyykkö, S. Riedel, and M. Patzschke, *Chemistry*, **11**: 3511 (2005); DOI: 10.1002/chem.200401299.

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv,
Physics Department,
Volodymyrska Str., 64,
UA-01601 Kyiv, Ukraine

²G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine
36, Academician Vernadsky Blvd.
UA-03142 Kyiv, Ukraine

¹ Fig. 1. Supercell of 64 Si atoms (small balls) with an oxygen embedded in a tetrahedral pore (large ball); view along directions $\langle 100 \rangle$ (a) and $\langle 110 \rangle$ (b).

² Fig. 2. Change of pressure in silicon supercells with point defects (Si_{64}O —interstitial oxygen; $\text{Si}_{63}\text{V}_{ac}$ —vacancy; Si_{64}C —interstitial carbon; Si_{64}Si —interstitial silicon) and in crystalline Si at their isotropic compression and stretching.

³ TABLE 1. Equilibrium volume and bulk modulus of silicon supercells with point defects (Si_{64}O —interstitial oxygen atom; $\text{Si}_{63}\text{V}_{ac}$ —vacancy; Si_{64}C —interstitial carbon atom; Si_{64}Si —interstitial silicon atom) and crystalline Si.

⁴ Fig. 3. The energy dependence of the electron density of states of 64 silicon-atoms' supercell containing an interstitial carbon atom in a tetrahedral pore.

⁵ **Fig. 4.** The energy dependence of the electron density of states of 64 silicon-atoms' supercell containing an interstitial silicon atom in a tetrahedral pore.

⁶ **Fig. 5.** The energy dependence of the electron density of states of 64 silicon-atoms' supercell containing a vacancy.

⁷ **Fig. 6.** The energy dependence of the electron density of states of 64 silicon-atoms' supercell containing an interstitial oxygen atom in a tetrahedral pore.

⁸ **Fig. 7.** Change of pressure in silicon supercells Si_{63}A with substitutional point defects (where A —N, B, P, As, Al, In) and crystalline Si at their isotropic compression and stretching.

⁹ **TABLE 2.** Covalent radius, equilibrium volume and bulk modulus of silicon supercells Si_{63}A with substitutional point defects (where A —N, B, P, As, Al, In) and crystalline Si.

¹⁰ **Fig. 8.** The energy dependence of the electron density of states of Si_{63}As supercell with the doping As atom in the substitutional state.

¹¹ **Fig. 9.** The energy dependence of the electron density of states of Si_{63}In supercell with the doping In atom in the substitutional state.