

## STUDIE VAN BIRADICALAIRE ZUURSTOFVACATURES IN KWARTS

*Keywords: Magnetische Resonantie spectroscopie, nanoporeuze materialen*

Siliciumdioxide ( $\text{SiO}_2$ ) is een materiaal dat van primair belang is in de microelectronica. Deze vaste stof vindt toepassing in ondermeer MOSFETs, de bouwsteen van deze technologie. Veel van de bijzondere eigenschappen van deze verbinding worden bepaald door de aanwezigheid van defecten in het rooster. Zo kunnen ze de “gate” karakteristieken van transistoren in positieve of negatieve zin beïnvloeden. Niet verwonderlijk, is dan ook heel wat onderzoek verricht omtrent de aard en werking van deze defecten. Kwarts fungeert daarin meestal als modelsysteem van de silicium-verbindingen in halfgeleiders. EPR experimenten, gekoppeld met moleculaire modellering zijn uitermate geschikt om de structuur en elektronische eigenschappen van de defecten te bestuderen. Het meest voorkomende defect (1 zuurstof vacature met  $S=1/2$ ) is in die optiek reeds uitvoerig bestudeerd [Laino2007, Weber 2009]. EPR spectra wijzen echter uit dat er ook heel wat defecten zijn met  $S=1$  [Mashkovtsev2007]. Vanuit experimentele hoek wordt een structuur voorgesteld waarbij twee zuurstof vacatures dicht bij elkaar zitten in de kristalstructuur. Een nauwgezette structurele identificatie ontbreekt echter nog steeds, ondermeer wegens het ontbreken van een gedegen computationele code voor de berekening van EPR grootheden met  $S>1/2$ .

**Doelstelling** Berekening van spectroscopische grootheden bij systemen met meer dan één ongepaard elektron ( $S > 1/2$ ) is nog problematisch en weinig uitgetest door confrontatie met experimentele data. In systemen met een grondtoestandsspin groter dan  $1/2$  wordt de nulveldsplittingsterm (Zero Field Splitting – ZFS) belangrijk in de spin Hamiltoniaan. Om deze grootheid theoretisch te bepalen, kunnen de volgende twee contributies meespelen: (i) een directe dipolaire spin-spin interactieterm tussen elektronenparen en (ii) verschillende spin-baankoppelingscontributies (bijvoorbeeld koppeling tussen het orbitaalmoment van een elektron en de spin van een ander elektron). Deze laatste is duidelijk een tweede orde perturbatieterm en zijn berekening vereist invoering van geëxciteerde toestanden met een spinmultipliciteit die verschillend kan zijn van deze van de grondtoestand, wat een bijkomende complexiteit inhoudt. Het is niet evident deze  $S > 1/2$  systemen te beschrijven binnen het DFT formalisme. Slechts zeer recent, in 2006, werd de eerste complete implementatie van de spin-spin en spin-baan termen binnen DFT ontworpen. De bedoeling van dit thesisonderwerp is om de EPR grootheden voor de defecten met  $S>1/2$  te berekenen in de hierboven geschetste systemen. Bijkomende theoretische modelontwikkeling behoort tot de mogelijkheden.

---

**Promotoren:** Prof. Dr. ir. V. Van Speybroeck - [veronique.vanspeybroeck@ugent.be](mailto:veronique.vanspeybroeck@ugent.be) (09/264.65.58),  
Dr. Ewald Pauwels - [ewald.pauwels@ugent.be](mailto:ewald.pauwels@ugent.be) (09/264.65.74) / **Begeleiding:** ir. A. Van Yperen - De  
Deyne andy.vanypendedeyne@ugent.be (09/264. 66.19) / <http://molmod.ugent.be/student-corner>