

На правах рукописи

ПОПКОВ Сергей Алексеевич

**ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ТОНКОЙ
СТРУКТУРЫ МЕЛКОГО ДОНОРНОГО ЦЕНТРА
ЛИТИЯ В МОНОИЗОТОПНОМ КРЕМНИИ**

Специальность 01.04.10 – Физика полупроводников

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Нижний Новгород – 2014

Работа выполнена в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук
профессор Ежевский Александр Александрович

Официальные оппоненты: Баграев Николай Таймуразович,
доктор физико-математических наук, ФТИ им.
А.Ф. Иоффе РАН, ведущий научный сотрудник

Жукавин Роман Хусейнович,
кандидат физико-математических наук, ИФМ
РАН, старший научный сотрудник

Ведущая организация: Казанский (Приволжский) федеральный
университет

Защита состоится «10» сентября 2014 г. в 16.00 часов на заседании диссертационного совета Д 212.166.01 при Нижегородском государственном университете им. Н.И. Лобачевского по адресу: 603950, Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23, корп. 3, Конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке и на сайте Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского (diss.unn.ru/381).

Автореферат разослан « ____ » _____ 2014 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета

Марычев М.О.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИССЕРТАЦИИ

Актуальность темы

Кремний, являясь основным материалом микро- и нанoeлектроники, в последние годы привлекает внимание еще и как перспективный элемент для создания приборов на спиновых эффектах за счет слабого в сравнении с типичными прямозонными полупроводниками спин-орбитального взаимодействия, больших времен спиновой релаксации и длин спиновой диффузии электронов проводимости [1]. Изотопически обогащенные кристаллы кремния являются объектами фундаментальных и прикладных исследований, направленных на глубокое понимание физических эффектов, определяемых различными примесными центрами и дефектами в кристаллической матрице полупроводника. Примесные центры – неотъемлемые структурные элементы реальных полупроводниковых материалов [2]. Являясь объектами наноскопического уровня, примеси определяют, в конечном счете, основные макроскопические свойства полупроводников: электро- и теплопроводность, оптические и магнитные свойства.

Постоянный интерес к исследованию дефектных центров определяется разнообразием систем, уникальность которых ведет к развитию целого спектра прикладных направлений, тем самым, предвещая обширное поле деятельности квантовой физики. В кремнии, несмотря на большую по сравнению с A_3B_5 изученность дефектов, еще остается много нерешенных задач в исследованиях электронной структуры как глубоких, так и мелких центров. Уникальные свойства системы, помимо особенностей примесных центров, определяются также и матрицей полупроводника. Хорошо известно, что природный кремний (Si) содержит три стабильных изотопа: ^{28}Si 92.23%, ^{29}Si 4.67%, ^{30}Si 3.10%. Случайное распределение изотопов, как по массе, так и по магнитному моменту, приводит к заметным локальным изменениям параметров твердых тел: энергий фононов, ширины запрещенной зоны [3-5], распределений магнитных полей, создаваемых ядрами спинов изотопа ^{29}Si , дающими вклад в сверхтонкое взаимодействие, – и, как следствие, к неоднородному уширению линий в спектрах электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) и оптических спектрах поглощения глубоких и мелких примесей, фотолюминесценции связанных экситонов, а также к расщеплению основного состояния мелких акцепторов в кремнии [6]. Энергия связи основного и возбужденных состояний мелких примесей изменяется в зависимости от изотопной массы [7].

Исследования изотопно-обогащенных материалов показали существенное сужение линий ЭПР электронов, локализованных на фосфоре, в образцах монокристаллического кремния-28 (99.88% ^{28}Si); подобный эффект впервые был обнаружен Феером с группой исследователей фирмы Бэлл (США) [8]. В последующих исследованиях [9] было показано, что использование кремния, обогащенного изотопом, не

имеющим ядерного спина (например, ^{28}Si), позволяет существенно увеличить разрешение в спектрах ЭПР и детально изучить особенности структуры и электронных свойств парамагнитных дефектных и примесных центров в изотопно-обогащенных кристаллах. Таким образом, создание приборов с использованием изотопно-обогащенных материалов является перспективной областью в полупроводниковой инженерии, в частности, для создания квантовых компьютеров.

На сегодняшний день существует несколько перспективных моделей для создания приборов, работающих на квантовых эффектах с возможностью манипуляции спиновыми состояниями [10]. Создание прибора спинтроники, в основе которого лежат твердотельные технологии, позволит совместить в рамках единого технологического решения функциональные элементы, базирующиеся на законах как классической, так и квантовой физики. Современные наработки в области создания спиновых кубитов в кремнии сталкиваются с рядом трудностей: проблема управления квантовыми состояниями, управления свойствами ансамбля спинов, высокие скорости декогеренции. Одной из альтернативных моделей, позволяющих в определенной степени решить эти проблемы, является модель кубита на основе орбитально вырожденного основного состояния донора лития в кремнии, предложенная впервые в [11].

Изолированный литий в кремнии является мелким донором внедрения и обладает инвертированной в сравнении с донорами V группы последовательностью уровней: основное состояние электрона, локализованного на центре Si:Li, является пятикратно вырожденным без учета спина, в то время как традиционно наиболее энергетически выгодный синглетный уровень располагается примерно на 1.8 мэВ выше. Орбитально вырожденный уровень оказывается особенно чувствительным к внешним механическим нагрузкам и электрическим полям, что открывает большие возможности для управления квантовыми состояниями. С другой стороны, слабое спин-орбитальное взаимодействие, как кремниевой матрицы, так и самого примесного атома, обуславливает достаточно высокие времена как продольной, так и поперечной релаксации. В реальных кристаллах, однако, вырождение основного состояния может частично понижаться в результате влияния различных дефектов и создаваемых ими механических напряжений, сформировавшихся, в частности, в процессе роста. В результате адекватное теоретическое описание основного состояния донорного центра лития в кремнии, учитывающее как влияние спин-орбитального взаимодействия, так и внешних и внутренних механических напряжений, оказывается весьма сложным в силу трудности оценки влияния внутренних механических напряжений на структуру основного состояния.

Согласно проведенному анализу литературных данных, существующие модели [11, 12] не в состоянии описать экспериментальные параметры в пределах порядка величины. В настоящей диссертационной работе предложен комплексный подход по исследованию особенностей

электронной структуры мультиплета основного состояния изолированного центра лития в изотопически обогащенном ^{28}Si , базирующийся, главным образом, на методе электронного парамагнитного резонанса. Техника спектроскопии ЭПР позволяет подробно исследовать структуру орбитально вырожденного основного состояния донора лития и выявить роль определяющих ее механических напряжений.

Цель работы

Изучение особенностей тонкой структуры мелкого донорного центра лития в изотопно-обогащенном ^{28}Si , в частности, расщеплений основного состояния примесного лития под действием механизмов, связанных со спин-орбитальным взаимодействием, упругими полями, внешним магнитным полем.

Задачи работы

1. Исследование особенностей спектров спинового резонанса электронов, локализованных на донорах лития и железа в кремнии природного изотопного состава и обогащенном изотопами ^{28}Si (более 99.99%), ^{29}Si (более 99.9%).
2. Определение вклада в расщепление основного состояния от внутренних деформаций в кремнии, как в исходных образцах, так и легированных примесными центрами, на основе анализа формы линии тензочувствительного парамагнитного центра.
3. Нахождение собственных значений матрицы полного спин-гамильтониана, на основе которых производится уточнение параметров спин-орбитального взаимодействия в основном состоянии изолированного центра и упругих напряжений в изотопно-обогащенном кремнии.

Научная новизна

Научная новизна диссертационной работы заключается в обнаружении следующих эффектов и впервые полученных данных:

1. На основании исследования ширины линии парамагнитного резонанса изолированного донорного центра лития в моноизотопном кремнии ^{28}Si выявлено, что центр Li в процессе диффузии не создает дополнительных механических напряжений, а сделанная оценка вклада упругих полей подтверждает модель, в которой основное состояние примесного центра расщепляется под действием внутренних напряжений, а поправки, связанные с долино-орбитальным взаимодействием и внешним магнитным полем, можно учесть во втором порядке теории возмущения.
2. Впервые в изотопно-обогащенном кремнии ^{28}Si определена величина остаточных деформаций Δ в образцах, легированных примесными центрами, а также параметры междолинного спин-орбитального взаимодействия λ и λ' в основном состоянии изолированного центра лития.

3. Показано, что положение линий спектров ЭПР донорного Li в моноизотопном ^{28}Si , описываемых триплетными и дублетными состояниями, слабо подвержено воздействию со стороны внешних механических деформаций. Подобный вывод был не очевиден, т.к. в ранних работах утверждалось обратное [12].

Практическая значимость

Результаты, полученные в данной работе, способствуют более детальному пониманию природы междолинных спин-орбитальных взаимодействий для основного состояния мелкого донора в кремнии и могут быть полезны при конструировании приборов, работающих на основных принципах спинтроники.

Основные положения, выносимые на защиту

1. В моноизотопном ^{28}Si при $N_{\text{Li}} \sim 2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ и низких температурах ($T=3.8\text{K}$) спектры с $g < 2.000$, описываемые триплетными и дублетными состояниями, относятся к изолированному центру Li и наблюдаются независимо от механических напряжений, прикладываемых к образцу.
2. В изотопно-обогащенном кремнии ^{28}Si величины параметров междолинного спин-орбитального взаимодействия для мелкого донорного центра Li составляют $\lambda = (1 \div 4) \cdot 10^{-9} \text{ эВ}$ и $\lambda' = (1.5 \div 5.6) \cdot 10^{-9} \text{ эВ}$, и дают наименьшие значения в ряду мелких доноров в кремнии.
3. Внешнее механическое напряжение не вызывает сильного смещения линий парамагнитного резонанса основного состояния мелкого донорного центра Li в ^{28}Si , но оказывает влияние на их интегральную интенсивность из-за энергетического смещения вследствие перераспределения заселённости долин.
4. Использование моноизотопного ^{28}Si и тензочувствительного парамагнитного центра Fe^0 позволяет исследовать малые механические деформации как в исходных кристаллах, так и в образцах, легированных мелким донорным центром.

Личный вклад автора

Автором внесён определяющий вклад в получение основных экспериментальных результатов от создания оборудования, приготовления образцов и проведения измерений до анализа экспериментальных результатов с применением специальных программ по расчёту параметров спектров ЭПР, разработанных автором. Планирование экспериментов, обсуждение и анализ результатов проводились совместно с научным руководителем проф. А.А. Ежевским.

Апробация работы

Основные результаты диссертационной работы представлялись на следующих конференциях, симпозиумах и научных школах:

- VII, VIII, IX международных конференциях «Кремний» (гор. Нижний Новгород, 2010 г., гор. Москва, 2011 г., гор. Санкт-Петербург, 2012 г.),
- 31 международной конференции по физике полупроводников «ICPS-31» (гор. Цюрих, Швейцария, 2012 г.),
- XV, XVI, XVII международных симпозиумах «Нанопизика и наноэлектроника» (гор. Нижний Новгород, 2011, 2012, 2013 г.),
- 7 Зимней молодежной школе – конференции «Магнитный резонанс и его приложения» (гор. Санкт-Петербург, 2010 г.),
- 13, 14 Всероссийских молодежных конференциях по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто-и наноэлектронике (гор. Санкт-Петербург, 2011, 2012 г.),
- XV Нижегородской сессии молодых учёных (гор. Нижний Новгород, 2010).

Публикации

По материалам диссертационной работы опубликовано 16 научных работ: 6 статей в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК, и 10 публикаций в материалах международных и всероссийских конференций.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Объем диссертации составляет 136 страниц, включая 71 рисунок и 4 таблицы. Список литературы содержит 106 наименований.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ

Во **введении** обоснована актуальность исследования, кратко описано состояние проблемы на текущий период, сформулированы цель и основные задачи диссертационной работы, показаны научная новизна и практическая значимость полученных результатов, приведены основные положения, выносимые на защиту, а также сведения об апробации результатов.

Первая глава содержит краткий обзор литературных источников по тематике мелких донорных центров. Приведено рассмотрение основного состояния доноров пятой группы и примесного центра лития. Используя предшествующие наработки, рассматриваются действия механизмов, связанных со спин-орбитальным взаимодействием, упругими полями, внешним магнитным полем, которые могут давать вклад в расщепление орбитально вырожденных состояний. Далее идет описание парамагнитных центров – тензочувствительных зондов, на основе которых можно определить вклад остаточных деформаций, создаваемых как в процессе роста кристалла, так и от примесного центра. В кремнии в качестве

тензочувствительных центров [13] в ЭПР выступают глубокие доноры, такие как Mn^0 и Fe^0 .

Обзор литературных данных продолжается анализом работ, описывающих роль изотопических эффектов в методе ЭПР. Многочисленные работы, в основе которых используется явление ЭПР, посвящены анализу таких характеристик спектра, как форма и ширина линии и его интегральная интенсивность. Поэтому в первой главе особое внимание уделяется изотопическим эффектам, влияющим на ширину линии спектра.

Вторая глава посвящена возможностям спектроскопии ЭПР, как метода исследования. В ней описаны основы явления электронного парамагнитного резонанса, и проводится сравнительный анализ с другими резонансными методами исследования примесных центров. Рассмотрены основные моменты в работе спектрометра ЭПР, в частности спектрометра X-диапазона BRUKER-EMXplus-10/12 с гелиевым криостатом и системой контроля температуры (3.8–300K)ER 4112 HV. Приводятся характеристики прибора, гарантирующие условия эксперимента, при которых параметры спектров ЭПР исследованных образцов измеряются с высокой точностью. В главе также описан уникальный эксперимент, в котором использовалась приставка к спектрометру BRUKER-EMXplus-10/12, позволяющая создавать упругие напряжения в заданных кристаллографических направлениях образца при низких температурах измерения.

Исследования примесных центров проводились на образцах кремния с природным изотопным составом (промышленные образцы) и обогащенных одним из стабильных изотопов (в частности ^{28}Si). Образцы моноизотопного кремния с содержанием изотопа ^{28}Si 99.99% были получены из кристалла, выращенного методом бестигельной зонной плавки в атмосфере аргона (ИХВВ РАН [14]), или из бездислокационного кристалла, полученного методом бестигельной зонной плавки в вакууме (Leibniz Institute for Crystal Growth, Берлин [15]). Для легирования образцов кремния донорной примесью лития и железа применялся метод диффузии с поверхности образца.

Для численного расчета угловых зависимостей спектров примесного центра лития разработан алгоритм, который позволяет моделировать анизотропию g-фактора для мультиплета 1s-состояния донорного центра лития при учете в полной матрице спинового гамильтониана различных механизмов взаимодействия. Подробное описание предложенного алгоритма приведено во второй главе. На его основе реализовано программное обеспечение в системе компьютерной алгебры Mathematica версии 7.0 на языке программирования Wolfram.

Третья глава посвящена исследованиям особенностей тонкой структуры мелкого донорного центра лития в моноизотопном кремнии. На первом этапе приводятся результаты исследований образцов кремния с

природной композицией изотопов и обогащенные ^{29}Si , легированных литием, в которых наблюдались одиночные бесструктурные линии, уширенные сверхтонким взаимодействием с ядрами ^{29}Si . Далее ведется рассмотрение полученных экспериментальных данных примесного центра лития в моноизотопном ^{28}Si .

В образцах моноизотопного ^{28}Si , легированных литием, где остаточная концентрация кислорода $N_{\text{O}} \sim 10^{16} \text{ см}^{-3}$, при температурах 3.5-20 К наблюдались два типа линий: с тригональной симметрией g-фактора (рис. 1) и с тетрагональной симметрией g-фактора [16]. Исследование угловой зависимости спектров показало, что тригональная симметрия ($g \parallel [111]$) линий спектра соответствует электрону, локализованному на связи LiO. В таком центре и литий, и кислород находятся в ближайших тетраэдрических междоузлиях, поэтому связь ориентирована вдоль направления $[111]$, что обуславливает главную компоненту g-фактора вдоль тригональной оси. При этом предполагалось, что тетрагональная составляющая спектра связана с триплетными состояниями, относящимися к изолированному центру Li. Таким образом, высокая концентрация кислорода затрудняла наблюдение линий изолированного центра Li.

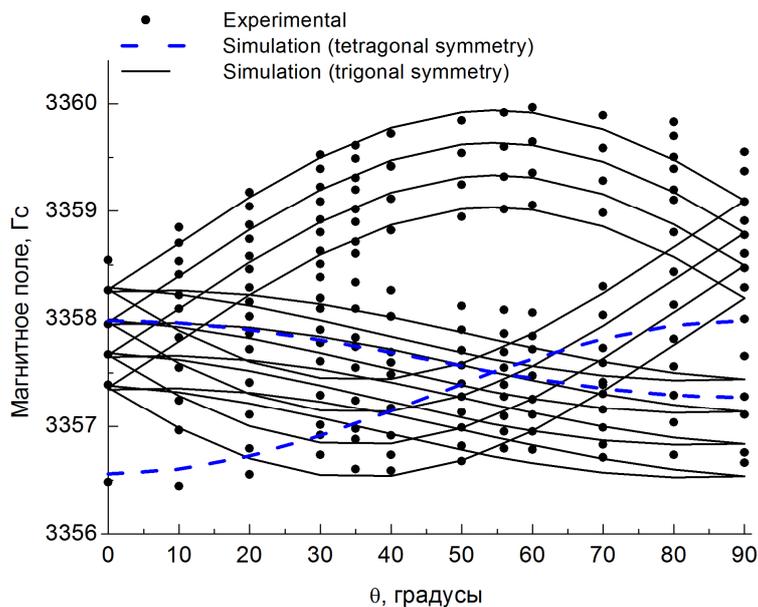


Рис. 1. Рассчитанные и экспериментальные угловые зависимости положения линий лития в моноизотопном кремнии с концентрацией лития 10^{18} см^{-3}

Для детального изучения тонкой структуры изолированного центра лития использовались образцы моноизотопного кремния, где остаточная концентрация кислорода не превышала $N_{\text{O}} \sim 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Кроме линий, относящихся к триплетным состояниям, на спектре ЭПР исследуемых образцов (рис. 2) присутствуют дополнительные линии от состояний дублета. Согласно представленным зависимостям (рис. 3) наблюдалось

семейство анизотропных спектров ЭПР, связанных с изолированным донорным центром Li.

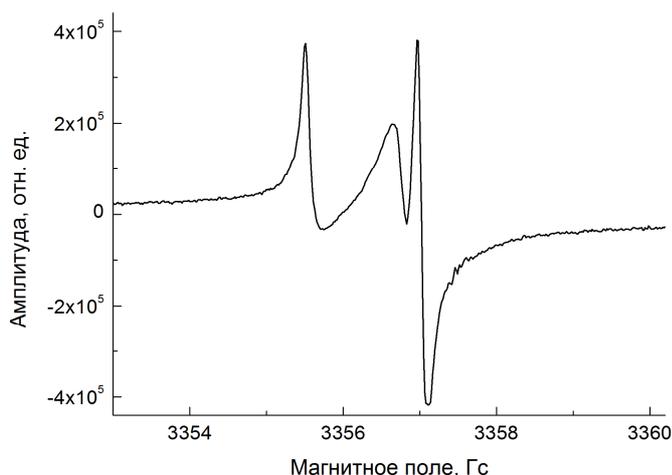


Рис. 2. Спектры ЭПР для образца ^{28}Si , легированного литием с содержанием кислорода $N_{\text{O}} \sim 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, для направлений магнитного поля вдоль оси [100] кристалла

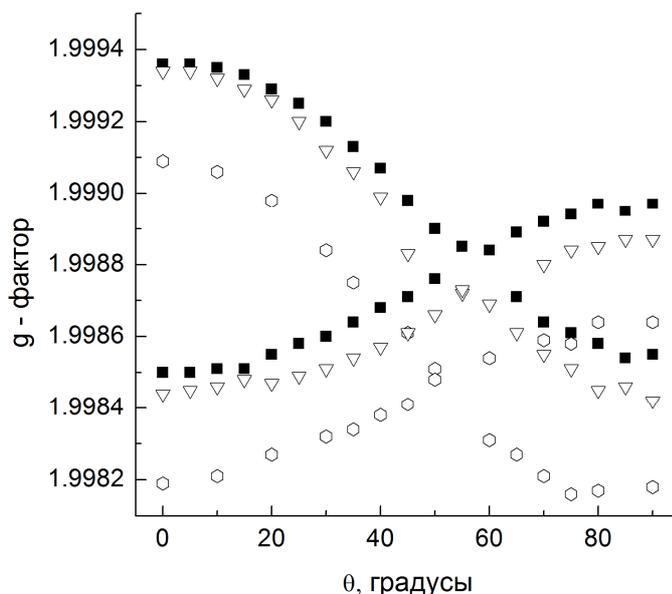


Рис. 3. Экспериментальные зависимости положения линий ЭПР для триплетных состояний от направления магнитного поля относительно оси [100] кристалла в плоскости $(0\bar{1}1)$ образца ^{28}Si , легированного литием. Кружки – диффузия Li производилась при $T=350^\circ\text{C}$ в течение 0.5 часа, образец после диффузии хранился при температуре 77 К; Квадратики – $T=400^\circ\text{C}$ в течение 0.5 часа, хранение аналогичное; Треугольники – после диффузии при $T=400^\circ\text{C}$ в течение 0.5 часа образец выдерживался при комнатной температуре в течение суток

Расчет угловых зависимостей спектров ЭПР примесного центра лития в ^{28}Si проведен в приближении второго порядка теории возмущения. В рассматриваемой модели предполагалось, что внутренние упругие поля дают больший вклад в начальное расщепление основного состояния лития, чем зеемановское и долин-орбитальное взаимодействие. В результате были

получены следующие выражения для компонент g-фактора для триплетных и дублетных состояний:

$$g_{x,y,z} = g_0 + 1/3(g_{\parallel} - g_{\perp})(3\zeta_{x,y,z}^2 - 1) - 6\lambda / \Delta(1 + \zeta_{x,y,z}^2) - 4\lambda' / \Delta'(1 - \zeta_{x,y,z}^2),$$

$$g_{\pm} = g_0 - 4\lambda' / \Delta' \mp (1/3(g_{\parallel} - g_{\perp}) + 2\lambda' / \Delta') [1 - 3(\zeta_x^2 \zeta_y^2 + \zeta_y^2 \zeta_z^2 + \zeta_z^2 \zeta_x^2)]^{1/2},$$

где $\zeta_x, \zeta_y, \zeta_z$ – направляющие косинусы магнитного поля относительно кубических осей кристалла, λ и λ' – параметры спин-орбитального (долин-орбитального) взаимодействия между состояниями триплет–триплет и триплет–дублет, соответственно, Δ и Δ' – параметры, отвечающие за расщепление состояний упругими полями, возникающими в кристалле, например, в результате диффузии лития, g_0 – g-фактор электрона, локализованного на мелком доноре, в котором учтен решеточный спин-орбитальный вклад [17].

Подобный подход отличался от ранее предложенной в [12] модели, согласно которой считалось, что внутренние упругие поля очень малы, и вызванные ими расщепления состояний дублета и триплета значительно меньше расщеплений, обусловленных зеемановским и долин-орбитальным взаимодействиями. Спин-орбитальное взаимодействие в [12] между состояниями по типу триплет-триплет и триплет-дублет учитывалось как поправка во втором порядке теории возмущений по отношению к зеемановскому. Такой теоретический подход был оправдан при описании спектров с $g > 2.000$, поскольку обеспечивал положительный сдвиг g-фактора, однако, не давал правильного описания полученных экспериментальных зависимостей, для которых g-фактор всегда оставался меньше 2.000.

Для подтверждения идеи о начальном расщеплении мультиплета основного состояния центра лития под действием упругих полей, в третьей главе представлены результаты эксперимента по влиянию на спектры ЭПР лития внешнего одноосного сжатия и растяжения кристалла. Согласно им, внешнее механическое напряжение не вызывает сильного смещения линий парамагнитного резонанса основного состояния мелкого донорного центра Li в ^{28}Si , но оказывает влияние на их интегральную интенсивность из-за энергетического смещения вследствие перераспределения заселённости долин. Согласно приведенным данным, значение энергии расщепления триплета оказалось сравнимо с энергией зеемановского расщепления ($g\mu_B H = 3.8 \cdot 10^{-5}$ эВ). Таким образом, выражения для g-факторов, полученные в приближении второго порядка теории возмущения в спиновом гамильтониане, могут давать не совсем верные оценки параметров. Поэтому анализ спектров производился с использованием полной матрицы спинового гамильтониана.

Результатом диагонализации полной матрицы спинового гамильтониана стал численный расчет зависимостей g-фактора для триплетных и дублетных состояний Li, удовлетворяющий экспериментальным данным (рис. 4).

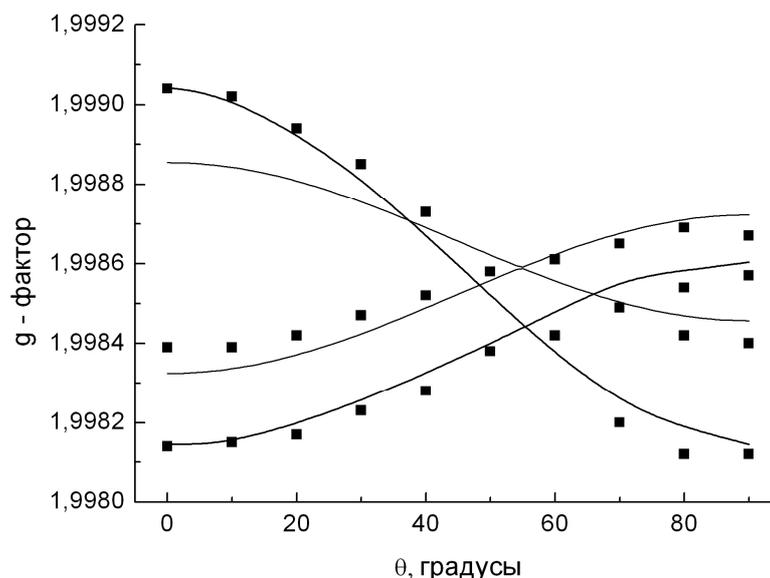


Рис. 4. Экспериментальные и рассчитанные зависимости положения линий ЭПР для триплетных и дублетных состояний от направления магнитного поля относительно оси $[100]$ кристалла в плоскости $(0\bar{1}1)$ образца ^{28}Si , легированного литием

В **четвертой главе** проводится анализ внутренних деформаций в образцах моноизотопного ^{28}Si посредством использования парамагнитного центра, спектр которого чувствителен к малым механическим деформациям. В кремнии в качестве тензочувствительного центра выступает глубокий донорный центр Fe^0 ($S=1, L=0$).

Железо в кремнии является примесью внедрения, имея схожий ковалентный радиус с кремнием; встраиваясь в тетраэдрические междоузлия, железо слабо деформирует решетку кристалла. Поэтому на основе угловых зависимостей ширины линии ЭПР примесного центра Fe^0 в ^{28}Si исследовалось распределение деформаций в кристалле, вызывающее неоднородное уширение линий для одноквантовых переходов $-1 \rightarrow 0$ и $0 \rightarrow +1$ ($\Delta M_s=1$). Параллельно с изучением внутренних деформаций кристалла в главе приводятся результаты исследований особенностей тонкой структуры Fe^0 в изотопно-обогащенном ^{28}Si , поскольку использование моноизотопного кремния позволило получить разрешенную тонкую структуру спектров ЭПР центра Fe^0 , не наблюдавшуюся в образцах кремния с природной композицией изотопов, а также рассмотреть сверхтонкие компоненты спектра, обусловленные взаимодействием локализованных электронов с ядрами изотопа ^{57}Fe . Спектры ЭПР центра Fe^0 представляли собой серию линий с узкой (ширина линии на полувысоте $\Delta B \sim 0.1$ Гс, что на 2 порядка меньше, чем у наблюдавшихся в ранних работах в природном кремнии) центральной компонентой, отвечающей двухквантовому переходу, на фоне заметно уширенных спутников – линий одноквантовых переходов.

Был проведен анализ угловой зависимости ширины линии ЭПР для мелкого донорного центра Li и для примесного Fe^0 . Корреляция этих зависимостей (рис. 5 и 6) свидетельствует о том, что деформации в кристалле создаются одним типом дефектов, как в случае иона железа, так и лития в кремнии. Используя значение ширины линии ЭПР примесного центра Fe^0 в изотопно-обогащенном ^{28}Si , измеренное для направления магнитного поля параллельно тетрагональной оси [100], найдена величина остаточных деформаций Δ , основной вклад в которую дают деформации, создаваемые дефектами кристалла.

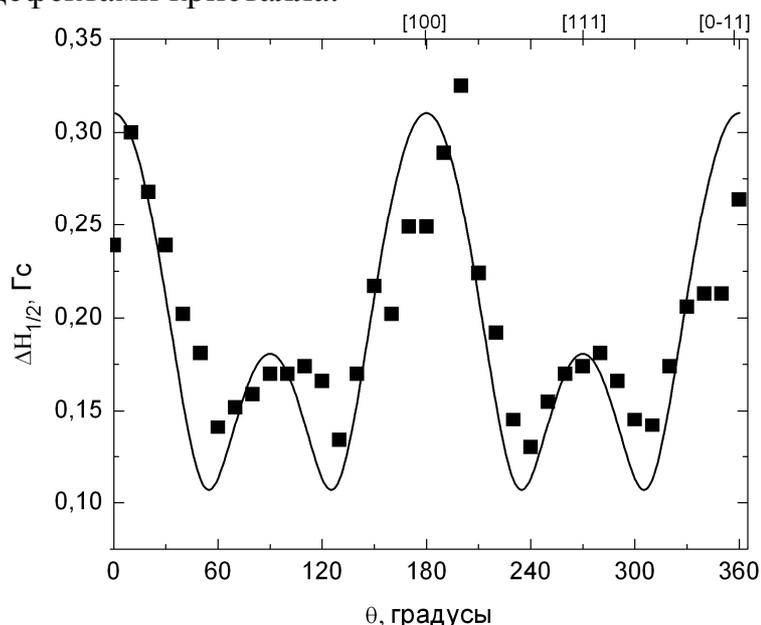


Рис. 5. Угловая зависимость ширины линии ЭПР Fe^0 для линии, соответствующей переходу $\Delta M_s=1$

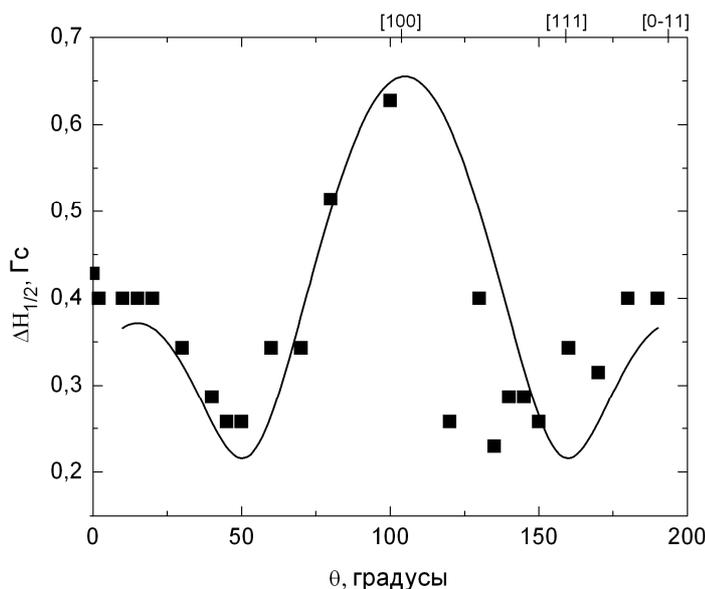


Рис. 6. Угловая зависимость ширины линии, соответствующей триплетному состоянию T_{2z} лития

В заключении сформулированы основные результаты и выводы диссертационного исследования.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИИ

Основные результаты диссертационной работы заключаются в следующем.

- В образцах кремния ^{28}Si с малым содержанием кислорода ($N_{\text{O}} \sim 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$) при низких температурах ($T = 3.8 \text{ K}$) обнаружено семейство анизотропных спектров ЭПР, связанных с изолированным донорным центром Li. Спектры наблюдались как без приложения, так и с приложением внешней нагрузки к образцу, и их g -факторы были меньше двух ($g < 2.000$), что существенно отличает их от спектров с $g > 2.000$, полученных в предшествующих работах [12].
- Благодаря значительному сужению линий ЭПР удалось провести анализ экспериментальных данных и численное моделирование спектра, которые выявили, что спектр с тетрагональной симметрией мелкого донорного центра Li состоит из линий, принадлежащих триплетному состоянию T_2 , а две другие линии в спектре имеют угловую зависимость, характерную для дублетного состояния E_{\pm} .
- Исследования угловых зависимостей ширины линии парамагнитного резонанса, соответствующей триплетному состоянию лития T_{2z} , показали, что примесный центр Li в процессе диффузии (при $T_{\text{диф.}} = 400 \text{ }^\circ\text{C}$) не создает дополнительных механических напряжений, поскольку для серий моноизотопных образцов ^{28}Si с $N_{\text{O}} \sim 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, полученных из одного слитка, но из разных его участков, для одних образцов наблюдается четко выраженная угловая зависимость с $dH_{\text{min}} \sim 0.25 \text{ Гс}$, носящая тетрагональный характер, для других образцов ширина изотропна с $dH_{\text{min}} \sim 0.17 \text{ Гс}$.
- Наблюдаемые угловые зависимости спектров ЭПР для триплетных и дублетных состояний с $g < 2.000$ описываются параметрами спин-орбитального взаимодействия на 3 порядка меньшими значениями по сравнению со значениями, найденными в предшествующих работах [12]. Моделирование спектров ЭПР с вариацией механических напряжений не позволяет трансформировать спектры, в которых $g > 2.000$ [12], в спектры с $g < 2.000$.

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Jansen R. Silicon spintronics // Nature Materials. 2012. Vol. 11. P. 400-408.
- [2] Павлов С.Г. Лазеры терагерцового диапазона частот на примесных центрах в кремнии и германии : дис. ... док. техн. наук. Нижний Новгород, 2010. 217 с.
- [3] Shallow impurity absorption spectroscopy in isotopically enriched silicon / M. Steger [et al.] // Phys. Rev. B. 2009. Vol. 79. P. 205210.
- [4] Direct observation of the donor nuclear spin in a near-gap bound exciton transition: ^{31}P in highly enriched ^{28}Si / M.L.W.Thewalt [et al.] // J.Appl.Phys. 2007. Vol. 101. P. 081724.

- [5] Photoluminescence of Isotopically Purified Silicon: How Sharp are Bound Exciton Transitions? / D. Karaiskaj [et al.] // *Phys.Rev.Lett.* 2001. Vol. 86. P. 6010-6013.
- [6] Cardona M., Thewalt M. L. W. Isotope effects on the optical spectra of semiconductors // *Reviews of Modern Physics.* 2005. Vol. 77. P. 1173.
- [7] Dependence of the ionization energy of shallow donors and acceptors in silicon on the host isotopic mass / D. Karaiskaj [et al.] // *Phys.Rev. B.* 2003. Vol. 68. P. 121201.
- [8] Spontaneous Emission of Radiation from an Electron Spin System / G. Feher [et al.] // *Phys. Rev.* 1958. Vol. 109. P. 221.
- [9] High-resolution magnetic-resonance spectroscopy of thermal donors in silicon / V.V. Emtsev Jr. [et al.] // *Physica B.* 2006. Vol. 376. P. 45–49.
- [10] Spin electronics – a review / Gregg J.F. [et al.] // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2002. Vol. 35. № 18. P. R121–R155.
- [11] Smelyanskiy V. N., Petukhov A. G., Osipov V. V. Quantum computing on long-lived donor states of Li in Si // *Phys. Rev. B.* 2005. Vol. 72. P. 81304.
- [12] Watkins G.D., Ham F.S. Electron paramagnetic resonance studies of a system with orbital degeneracy: the lithium donor in silicon // *Phys. Rev.* 1970. Vol.1. P.4071–4098.
- [13] ЭПР тензозондов в кремнии легированном гадолинием / А.А. Бугай [и др.] // *ФТТ.* 1985. Т. 27. С. 1824–1829.
- [14] Гусев А. В., Гавва В.А., Козырев Е.А. Выращивание монокристаллов стабильных изотопов кремния // *Перспективные материалы.* 2010. № 8. С. 366–369.
- [15] Enrichment of silicon for a better kilogram / P. Becker [et al.] // *Phys. Status Solidi A.* 2010. Vol. 207. No. 1. P. 49–66.
- [16] Сухоруков А.В. Изотопические эффекты в спиновом резонансе электронов с различной степенью локализации в кремнии : дис. ... канд. физ.-мат. наук. Нижний Новгород, 2012. 119 с.
- [17] Roth L. M. g Factor and Donor Spin-Lattice Relaxation for Electrons in Germanium and Silicon // *Phys. Rev.* 1960. Vol. 118. P. 1534–1540.

СПИСОК РАБОТ ПО ДИССЕРТАЦИИ

Основное содержание диссертационной работы отражено в следующих публикациях:

- A1. Спиновый резонанс электронов с различной степенью локализации в кремнии с изменённым изотопным составом / А.А. Ежевский, А.В. Гусев, Д.В. Гусейнов, А.В. Сухоруков, С. А. Попков // **Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского.** 2010. №5. С.321-329.
- A2. Исследование структуры основного состояния донорного центра лития в кремнии, обогащенном изотопом ^{28}Si , и влияния на нее внутренних деформаций кристалла / А.А. Ежевский, С.А. Попков,

- А.В. Сухоруков, Д.В. Гусейнов, N.V. Abrosimov, H. Riemann // **Физика и техника полупроводников**. 2012. № 11. Т.46. С.1468-1474.
- A3. Моноизотопный кремний ^{28}Si в спектроскопии спинового резонанса электронов, локализованных на донорах / А.А. Ежевский, С.А. Попков, А.В. Сухоруков, Д.В. Гусейнов, В.А. Гавва, А.В. Гусев, N.V. Abrosimov, H. Riemann // **Физика и техника полупроводников**. 2013. № 2. Т.47. С.168-173.
- A4. Влияние деформаций на спектры ЭПР донорных центров лития и железа в моноизотопном ^{28}Si / А.А. Ежевский, С. А. Попков, А.В. Сухоруков, Д.В. Гусейнов, В.А. Гавва, А.В. Гусев, Д.Г. Зверев, N.V. Abrosimov, H. Riemann // **Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского**. 2013. №2. С.79-87.
- A5. Valley spin-orbit interaction for the triplet and doublet 1s-ground states of lithium donor center in monoisotopic ^{28}Si /A.A. Ezhevskii, S.A. Popkov, A.V. Soukhorukov, D.V. Guseinov, N.V. Abrosimov, H. Riemann, A.A. Konakov // **AIP Conference Proceeding**. 2013. Vol. 1566. P. 339-340.
- A6. Monoisotopic ^{28}Si in spin resonance spectroscopy of electrons localized on shallow donors / A.A. Ezhevskii, S.A. Popkov, A.V. Soukhorukov, D.V. Guseinov, A.A. Konakov, N.V. Abrosimov, H. Riemann // **Solid State Phenomena**. 2013. V. 205 – 206. P. 191-200.
- A7. Ezhevskii A.A., Guseinov D.V., Soukhorukov A.V., Gusev A.V., Popkov S.A. Electron paramagnetic resonance of lithium related donors in monoisotopic silicon // 7th European Federation of EPR Groups Meeting and Closing Meeting of COST P15. Antwerp, Belgium. 2009. p. 70.
- A8. Ezhevskii A.A., Popkov S.A., Soukhorukov A.V., Guseinov D.V., Abrosimov N.V., Riemann H., Valley spin-orbit interaction for the triplet and doublet 1s-ground states of lithium donor center in monoisotopic ^{28}Si // ICPS-31. Zurich, Switzerland. 2012. P. 94.
- A9. Гусейнов Д.В., Ежевский А.А., Сухоруков А.В., Попков С.А., Гусев А.В., Гавва В.А. Спектры ЭПР высокого разрешения центра Fe^0 в кремнии, обогащенном изотопом ^{28}Si // Тезисы докладов VII международной конференции «Кремний 2010». Нижний Новгород. 2010. С.139.
- A10. Попков С.А., Ежевский А.А., Гусейнов Д.В., Сухоруков А.В., Гусев А.В., Гавва В.А. Спектры ЭПР иона Fe^0 в моноизотопном кремнии ^{28}Si // 7-ая Зимняя молодежная школа-конференция «Магнитный резонанс и его приложения». Санкт-Петербург. 2010. С. 181.
- A11. Гусейнов Д.В., Ежевский А.А., Попков С.А., Сухоруков А.В., Гусев А.В., Гавва В.А. О природе спектров ЭПР в кремнии, обогащенном изотопом Si -28 с примесью железа // Тезисы докладов VIII международной конференции «Кремний 2011». Москва. 2011. С.207.
- A12. Ежевский А.А., Гусейнов Д.В., Попков С.А., Сухоруков А.В., Абросимов Н.В. Исследование мелкого донорного центра лития в кремнии, обогащенном изотопом кремния-28 // Тезисы докладов 13 всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников

- и наноструктур, полупроводниковой опто-и наноэлектронике. Санкт-Петербург. 2011. С.88.
- A13. Ежевский А.А., Попков С.А., Сухоруков А.В., Гусейнов Д.В., Гавва В.А., Гусев А.В., Абросимов Н.В., Riemann Н. Моноизотопный кремний-28 в спектроскопии спинового резонанса электронов, локализованных на донорах // Тезисы докладов IX международной конференции «Кремний 2012». Санкт-Петербург. 2012. С.35.
- A14. Ежевский А.А., Попков С.А., Гусейнов Д.В., Сухоруков А.В., Абросимов Н.В., Riemann Н. Исследование структуры основного состояния донорного центра лития в кремнии -28 и влияние на нее внутренних деформаций кристалла // Труды XVI международного симпозиума «Нанопизика и наноэлектроника». Нижний Новгород. 2012. С. 247-248.
- A15. Попков С.А., Ежевский А.А., Гусейнов Д.В., Сухоруков А.В., Гусев А.В., Гавва В.А. Абросимов Н.В., Riemann Н. Центр Fe^0 как тензозонд в моноизотопном ^{28}Si // Тезисы докладов 14 всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто-и наноэлектронике. Санкт-Петербург. 2012. С.8.
- A16. Ежевский А.А., Попков С.А., Сухоруков А.В., Гусейнов Д.В., Abrosimov N.V., Riemann Н. Исследование междолинных спин-орбитальных взаимодействий электронов в вырожденном основном состоянии мелкого донорного центра лития в моноизотопном кремнии ^{28}Si // Труды XVII международного симпозиума «Нанопизика и наноэлектроника». Нижний Новгород. 2013. С 447-448.

ОГЛАВЛЕНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Введение

1. Обзор литературы

Мелкие и глубокие примесные центры в кремнии

1.1 Волновая функция мелкого донорного центра

1.2. Донорные состояния под действием внешних и внутренних полей

1.3. Глубокие доноры как тензочувствительные центры в кремнии

1.4 Изотопические эффекты в спектроскопии электронного

парамагнитного резонанса

2. Методика эксперимента

2.1. Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса

2.2. Техника эксперимента

2.3. Характеристика исследованных образцов

2.4. Моделирование угловых зависимостей спектров с использованием полной матрицы спинового гамильтониана

2.5. Выводы к главе 2

3. Исследование орбитально-вырожденных электронных состояний мелкого донорного центра лития в изотопно-обогащенном кремнии

3.1. ЭПР спектроскопия центров Li и LiO в кремнии

3.2. Расчет угловых зависимостей спектров в приближении второго порядка теории возмущения

3.3. Расчет угловых зависимостей спектров с использованием полной матрицы спинового гамильтониана

3.4. Выводы к главе 3

4. Исследование вклада упругих полей в ширину линии донорного центра в кремнии

4.1. ЭПР спектроскопия центра Fe в кремнии, чувствительного к малым деформациям кристалла, связанными с упругими полями дефектов

4.2. Ширина линии ЭПР как функция распределения деформаций в кристалле

4.3. Выводы к главе 4

Заключение

Литература