

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертацию Калининой Екатерины Александровны «Магнитно-резонансные исследования поведения доноров в кристаллах Si и $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ с модифицированными изотопным составом и спин-орбитальным взаимодействием»,
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.11. – «Физика полупроводников»

Актуальность темы. Диссертация Калининой Е. А. посвящена исследованиям возможностей эффективного задействования такого хорошо изученного и технологически разработанного материала, как кремния, для решения актуальных задач реализации на его основе кубитов и элементов спинтроники. Для первых необходимым требованием является большое время фазовой релаксации, что обеспечивалось использованием в качестве образцов монокристаллических твердых растворов $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, в которых оба элемента представлены изотопами ^{28}Si и ^{72}Ge , ядра которых не имеют собственного магнитного момента. В спинтронике актуальным вопросом является возможность записи/чтения информации без задействования магнитного поля, что повысит быстродействие и энергоэффективность, например, магниторезистивной памяти. Для этого могут быть использованы спиновые эффекты Холла – явления спин-зарядовых преобразований, в высокой степени обусловленные спин-орбитальным взаимодействием. Сам по себе кремний характеризуется слабым спин-орбитальным взаимодействием и как материал для подобных преобразований непригоден. Однако его легирование тяжелыми примесями, выполняющими одновременно роль доноров, как выясняется, может наделить кремний требуемой функциональностью. Не вызывает сомнения, что целенаправленная модификация кремния с целью получения практически значимых материалов для квантовых компьютеров и спинтронных устройств, составляющая предмет диссертации Калининой Е.А., характеризуется высокой степенью актуальности и практической значимости.

Мощным экспериментальным методом для исследований состояний локализованных носителей в полупроводниках является электронный парамагнитный резонанс. Информация о структуре и свойствах таких парамагнитных объектов извлекается из структуры стационарных спектров, а также из данных по магнитной релаксации.

Краткая характеристика основного содержания диссертации.

Диссертация Калининой Е.А. состоит из введения, пяти глав, заключения, списка публикаций по теме диссертации и списка цитируемой литературы.

Во **введении** обосновывается актуальность темы диссертации и степень разработанности предмета исследования, формулируются цель и задачи работы, выделяются такие ее характеристики, как научная новизна, теоретическая и практическая значимость, кратко описываются методология подхода и методы исследований, представлены апробация работы, число и характер публикаций, структура и объем диссертации, выделен личный вклад соискателя и сформулированы положения, выносимые на защиту.

В **первой главе** представлен литературный обзор по микроскопической структуре, энергетическим спектрам и механизмам спиновой релаксации донорных центров в кремнии, с акцентом на элементы V группы. Также даны необходимые представления о спиновых токах, спиновых эффектах Холла и сопутствующих явлениях, затрудняющих иногда интерпретацию экспериментальных данных. Предложены способы учета таких сопутствующих явлений и условия, когда ими можно пренебрегать.

Во **второй главе** описаны объекты исследований, методы их синтеза и конкретные характеристики образцов, изученных в рамках диссертации. Описаны применяемые методики измерения спектров электронного парамагнитного резонанса, спиновой релаксации, экспериментальному изучению спиновых эффектов Холла. Представлена также теоретическая база по оценке величины угла Холла и холловской ЭДС, обозначены физические процессы, обуславливающие и ограничивающие амплитуду эффектов. Введены основополагающие параметры и обозначены способы их модификации в кремнии.

Третья и четвертая главы посвящены результатам исследований объектов с высокой степенью уникальности, а именно твердых растворов $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, содержащих примеси мелких доноров фосфора и лития, соответственно. Использование в качестве компонент твердых растворов моноизотопных ^{28}Si и ^{72}Ge , не обладающих собственным магнитным моментом ядра, позволило получить образцы с малой шириной линий ЭПР от носителей, локализованных на примесных атомах. В этих условиях оказались разрешенными компоненты спектра ЭПР, обусловленные сверхтонким взаимодействием в случае фосфора и тонкой структуры в случае лития. В главе 3 показано, что локализованные на примесных атомах фосфора носители образуют наборы хорошо определенных парамагнитных центров, различающихся величинами константы сверхтонкого взаимодействия и

долинно-орбитального расщепления. Эти центры обусловлены формированием примесными атомами фосфора в твердых растворах $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ локальных конфигураций Si-Ge-P, отвечающих минимальному возмущению кристалл-матрицы кремния. Как и следовало ожидать, соотношение концентраций различных типов центров зависит от состава твердого раствора.

В четвертой главе исследованы спектры ЭПР и магнитная релаксация носителей, локализованных при низких температурах на донорных атомах лития, занимающих в силу малого атомного радиуса тетраэдрические междоузельные позиции. Отсутствие проявления сверхтонкой структуры спектра ЭПР от таких центров связывается с тем, что основное долинно-орбитальное состояние является несинглетным, подобно ситуации в чистом кремнии. Показана зависимость структуры спектров образованных парамагнитных центров от состава твердых растворов. Установлено, что локальная симметрия детектируемых центров тригональная для малого содержания германия и тетрагональная для более высокого с границей 1 ат.%, с преобразованием тетрагональных центров в тригональные на большом временном масштабе. Существенным оказывается вклад в ширину линий ЭПР центров от случайных деформаций, связанных с разбросом в локальном химическом составе. Показано формирование двух типов центров носителей на литии, с существенно различающимися временами продольной и поперечной релаксации. Обсуждаются возможные механизмы релаксации для этих типов центров.

Пятая глава содержит, по сути, результаты моделирования амплитуды спин-холловской ЭДС как функции набора параметров слоя кремния в гетероструктуре типа ферромагнетик/проводник. Моделирование направлено на оптимизацию характеристик слоя кремния для получения максимальной величины эффекта. Даны конкретные значения уровней легирования слоя кремния фосфором и висмутом, из которых именно тяжелый висмут наделяет слой кремния значимым углом Холла. Также дана оптимальная толщина слоя кремния для достижения максимума спин-холловской ЭДС.

В Заключении формулируются основные результаты работы.

Наиболее важными результатами работы является то, что:

1. Благодаря малой ширине линий спектра ЭПР носителей, локализованных на донорных атомах фосфора, достигнутой за счет использования изотопически-чистых, лишенных собственного магнитного момента ядра кремния-28 и германия-72, показано что в твердых растворах $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ формируется ограниченная

совокупность хорошо определенных парамагнитных центров, различающихся значениями сверхтонкой константы и долинно-орбитального расщепления.

2. Продемонстрирована информативность носителей, локализованных на междоузельных примесях-донорах лития, как парамагнитных зондов локальной структуры монокристаллических твердых растворов $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$.

3. Продемонстрирован немонотонный, проявляющий максимум, характер зависимости величины ЭДС, возникающей вследствие обратного спинового эффекта Холла в бислое пермаллой/Si:P:Bi, что свидетельствует о возможности оптимизации структуры и состава слоя кремния для достижения высокого коэффициента спин-зарядового преобразования в такой структуре.

Представленные в работе результаты обладают несомненной **научной новизной, теоретической и практической значимостью**, что подтверждается публикациями соискателя в научных журналах, индексируемых в базах Scopus и Web of Science, рекомендованных ВАК при Минобрнауки РФ.

Обоснованность и достоверность полученных результатов обусловлена применением хорошо разработанных экспериментальных методик, высоким уровнем паспортизации объектов исследований, использованием установившихся значений эмпирических параметров и современных хорошо развитых и обоснованных теоретических подходов в моделировании, внутренней непротиворечивостью результатов. Кроме этого результаты диссертации докладывались и обсуждались на всероссийских и международных конференциях и научных семинарах.

Рекомендации по использованию результатов диссертации. Результаты диссертации могут быть использованы для создания кубитов для квантовых вычислений, а также при разработке элементов спинтронных устройств с высоким потенциалом интеграции с современной КМОП-технологией на основе кремния.

По диссертации имеются **замечания**.

1. Глава 3, стр. 48, рисунок 17: на каком основании составлялись пары линий ЭПР, из расщепления которых определялась величина сверхтонкой константы? Такие составленные пары никак не обозначены на рисунке 17, и этой информации не хватает.

2. Глава 3, стр. 53: в обсуждении результатов по сверхтонкой структуре говорится, что «...при этом важно отметить, что сохраняется изотропный характер СТВ и g-факторов и, следовательно, невозможны такие конфигурации, когда один атом германия попадает в первые координационные сферы донора, поскольку это

привело бы к нарушению локальной симметрии центра, что наблюдалось нами на примере лития в таких образцах». Вопрос: Насколько пространственно локализована волновая функция носителя в 1s-состоянии? Насколько она (вероятность нахождения на ядре) будет чувствительна по отношению к замещению атомов кремния атомами германия в части изотропности СТВ и g-фактора? Хорошим ли реперным объектом являются междоузельные примесные атомы лития?

3. Стр. 47, раздел 3.1, первый абзац: «...в изотопно-чистых монокристаллах $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (^{28}Si (99,998%) и ^{72}Ge (99,984%)) при $x = 0,39, 1,2, 2,9$ ат% наблюдались более узкие линии спектров ЭСР по сравнению с аналогичными кристаллами с природной композицией изотопов кремния и германия». К сожалению, в диссертации не приведены спектры тех же парамагнитных центров в кристаллах с природными композициями изотопов кремния и германия и не приводятся ширины линий. Такое сравнение в тексте диссертации было бы выигрышным.

4. На взгляд автора, в самом ли деле носители, локализованные на атомах лития, являются хорошими парамагнитными зондами, является верным? Учитывая несинглетный характер основного состояния и возможные динамические эффекты.

5. В подписях к рисункам 23 и 24 неправильно сопоставлены симметрия центров и ориентация главных направлений их g-тензоров.

6. Глава 5, стр. 83: имеется ссылка на рисунок 38 с результатами по моделированию характеристик слоя Si:P:Bi. Однако такой рисунок, по-видимому, отсутствует в диссертации. На актуальном рисунке 38 – данные по сурьме.

Высказанные замечания не снижают научной ценности диссертации и не затрагивают основных положений, защищаемых соискателем.

Заключение

Диссертация Калининой Е.А. «Магнитно-резонансные исследования поведения доноров в кристаллах Si и $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ с модифицированными изотопным составом и спин-орбитальным взаимодействием», представленная на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, является завершённой научно-квалификационной работой, выполненной на высоком профессиональном уровне. Диссертация отвечает критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней, утвержденным Постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. N 842, и соответствует требованиям, установленным пунктом

14 Положения о присуждении ученых степеней. Результаты исследований в достаточной мере опубликованы в научных журналах, рекомендованных ВАК при Минобрнауки РФ, индексируемых в базах Scopus и Web of Science, прошли апробацию на всероссийских и международных конференциях. Автореферат полностью отражает содержание диссертации. Калинина Екатерина Александровна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.11 – «Физика полупроводников».

18.05.2026

С обработкой персональных данных согласен.


Официальный оппонент:

кандидат физико-математических наук, доцент, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет», кафедра квантовой электроники и радиоспектроскопии, заведующий кафедрой




Юсупов Роман Валерьевич

Адрес: 420008, Россия, Республика Татарстан, г. Казань, ул. Кремлевская, д. 18

Тел.: +7 

E-mail: v@kpfu.ru

