

ПОВЕДЕНИЕ ИОНОВ МАРГАНЦА В КРЕМНИИ: ПАРНЫЕ ДЕФЕКТЫ И ЦЕНТРЫ ЗАМЕЩЕНИЯ

С. М. Якубеня

Рассмотрена проблема поведения примесей переходных элементов группы железа в кремнии на примере примесных ионов марганца, введенных в кремний. Предложенная в работе феноменологическая модель такого центра базируется в отличие от предлагавшихся ранее на представлении о двойном дефекте, состоящем из примесного иона марганца и вакансии кремния. Показано, что привлечение представлений о трех типах таких двойных дефектов (в настоящей работе рассматривается ситуация с сильным и промежуточным перекрытием волновых функций примесного иона и вакансии) позволяет объяснить весь набор экспериментальных факторов, полученных при исследовании системы Si : Mn, с единых позиций.

В первой части работы мы рассмотрели поведение примесных ионов марганца в кремнии для случая междоузельной локализации таких центров в кремнии. Было установлено, что в зависимости от положения уровня Ферми в запрещенной зоне кристалла могут быть реализованы четыре зарядовых состояния примесного центра Mn^- , Mn^0 , Mn^+ , Mn^{++} . При этом изменение зарядового состояния такого дефекта происходит в результате изменения степени заполнения орбиталей $(t_2^n)^{D_{3h}}$ (в интервале чисел заполнения n от 3 до 0), волновая функция которых сформирована из зонных p и примесных d состояний, преобразующихся по одному и тому же представлению симметрии. Однако названные выше центры неустойчивы и энергетические уровни в запрещенной зоне, связанные с их перезарядкой, как, впрочем, и соответствующие спектры ЭПР, исчезают с течением времени. Однако ответа на вопрос, связано ли это с распадом твердого раствора примеси марганца, введенной в кристалл, или обусловлено другими причинами, в рамках модели об изолированном центре получить не удастся. Обсуждению возможности объяснения данного эффекта с позиций двойного дефекта и посвящена настоящая работа. Кроме того, мы обсудим возможность объяснения экспериментальных данных по кинетическим измерениям и исследованию ЭПР в кристаллах Si : Mn для случая центров замещения также исходя из представлений о двойном дефекте и покажем, что и в этом случае число возможных зарядовых состояний примесного иона марганца в кремнии при условии, что уровень Ферми расположен в пределах запрещенной зоны, исчерпывается названными выше четырьмя состояниями (Mn^- , Mn^0 , Mn^+ , Mn^{++}).

1. Парные дефекты: модель и ее обсуждение

Механизм образования парных дефектов (второй тип двойных дефектов), в котором примесный ион занимает позицию во второй координационной сфере по отношению к вакансии кремния, можно проследить, если обратиться к работе по исследованию системы Si : Mn, в которой авторы среди прочих вопросов изучали процессы деградации таких образцов с течением времени [1].

Исследованные авторами образцы Si⟨Mn⟩ (исходные образцы до легирования имели дырочный тип проводимости, удельное электрическое сопротивление при комнатной температуре $\sim 10^2$ Ом·см) охлаждались со скоростью 0.5 К/с (скорость охлаждения образцов при закаливании в масле 10^3 К/с). Образцы представляют собой равновесные системы, и влиянием распада пересыщенного твердого раствора марганца в кремнии в этом случае можно пренебречь. Основной вклад в изменение концентрации примесных центров марганца с течением времени будут давать процессы, связанные с конфигурационной неустойчивостью. Измерения спектров DLTS и TSC (термостимулированная емкость) показывают, что концентрация центров Mn_i^+ , обуславливающих появление в запрещенной зоне локализованного состояния $E_c + 0.27$ эВ ([²], см. (12)),

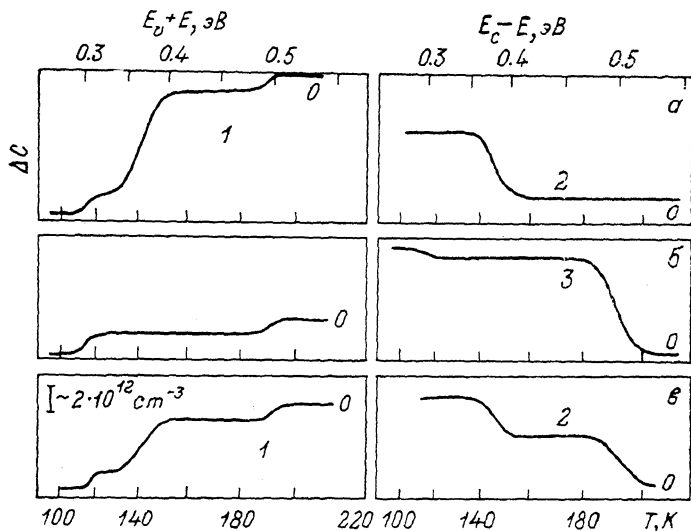


Рис. 1. Изменение концентрации центров с энергией активации $E_c + 0.27$ эВ ($Mn_i^{+/++}$), $E_c - 0.42$ эВ ($Mn_i^{0/+}$) и $E_c - 0.55$ эВ $(Mn-B)^{-/0}$ с течением времени (из измерений термостимулированной емкости TSC) [¹].

1 — $Mn_i^{+/++}$, 2 — $Mn_i^{0/+}$, 3 — $(Mn-B)^{-/0}$. а — через 2 мин после отжига при $T = 250$ °С, б — через 250 дней, в — через 14 дней хранения при $T = 20$ °С с момента приготовления.

монотонно уменьшается с течением времени, а концентрация центров и связанных с ними локализованных состояний $E_c - 0.55$ эВ растет (рис. 1). При этом оба процесса протекают синхронно, т. е. суммарная концентрация таких центров остается постоянной величиной. Исходя из этого, мы можем выдвинуть предположение, что исчезновение сигнала от центров внедрения в спектрах ЭПР и DLTS в первую очередь обусловлено образованием парного дефекта с вакансией и перераспределением электронной плотности внутри такого двойного дефекта.

Для идентификации зарядовых состояний партнеров, входящих в состав парного дефекта, который возникает в результате перераспределения электронной плотности внутри такого двойного дефекта, необходимо совместно с кинетическими исследованиями проводить исследования спинового резонанса. Такие исследования были выполнены авторами работы [³], которые в качестве исходных образцов для легирования использовали высокоомные образцы кремния ($\rho \sim 10^2 - 10^3$ Ом·см) с электронным типом проводимости. Было установлено, что уменьшение сигнала ЭПР и DLTS от центров Mn_i^0 ($E_c - 0.42$ эВ) при изохронном отжиге при $T = 450$ °С сопровождается, так же как и для центров Mn_i^+ , увеличением сигнала от центров, перезарядка которых обуславливает появление локализованного состояния $E_c - 0.55$ эВ (рис. 2). В спектрах ЭПР таких

образцов наблюдается сигнал от центров, характеризующийся следующими параметрами [4, 5]:

$$J = 2,$$

$$g_{\text{exp}} = 2.0063 \pm 0.0001,$$

$$A_{\text{exp}} = 12.8 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}. \quad (1)$$

Исследования спектров ЭПР в таких образцах при наличии оптического возбуждения подтверждают наличие взаимосвязи между указанными центрами (рис. 3) [6, 7].

Поэтому, принимая во внимание все сказанное выше об электронной и локальной структуре кристаллического окружения примесных ионов марганца, можно сделать вывод, что ответственным за появление в спектрах фото-ЭПР и DLTS локализованного состояния $E_c - 0.55$ эВ при

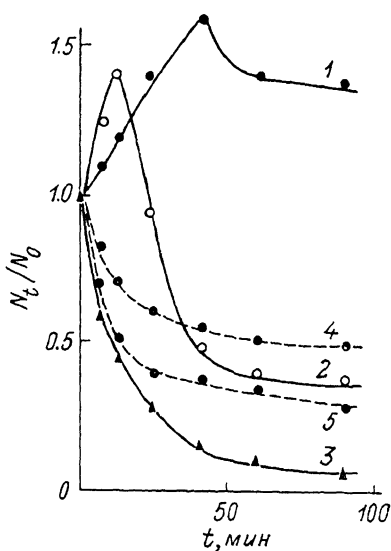


Рис. 2. Изменение относительной концентрации центров N_t/N_0 с различной энергией активации в результате изотермического отжига (423 К) в зависимости от длительности отжига.

1 — $E_c - 0.54$, 2 — 0.42, 3 — 0.20 эВ, 4 и 5 — ловушки, детектируемые в образцах контрольной серии с другими энергиями активации [1].

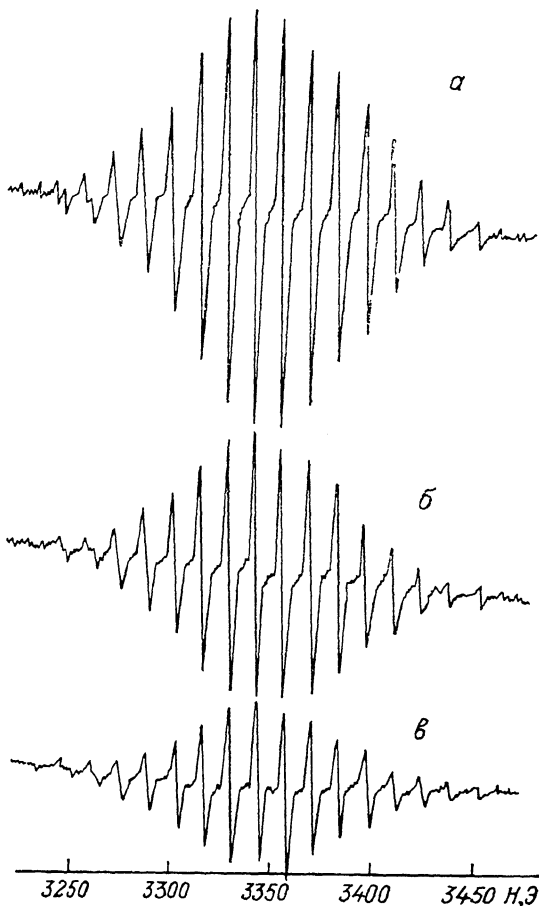


Рис. 3. Изменения спектров ЭПР центров, идентифицированных как кластер $(Mn^0)_4$ в результате фотовозбуждения квантами света с энергиями $h\nu = 0.55$ (а), 0.52 эВ (б) и до облучения (в) [7].

легировании кремния марганцем является центр $[Mn_2^+ - V_{Si}^-]$, а вовсе не комплекс $(Mn^0)_4$, как это предполагалось ранее [4, 5], или центр $[Mn - V]$, как было предложено в [1].

Симметрия кристаллического окружения такого дефекта $[Mn_2^+ - V_{Si}^-]$ будет описываться точечной группой симметрии C_{1s} (ромбоэдрическая симметрия кристаллического окружения парного дефекта), что является следствием псевдовзаимодействия Яна—Теллера (кулоновское взаимодействие внутри такого двойного дефекта между партнерами — ось типа

[111]) и ян-теллеровской неустойчивостью примесного центра марганца в зарядовом состоянии Mn_4^+ (тетрагональная мода колебаний, искажения комплекса вдоль одной из осей типа [100]). Фактор Ланде примесного центра марганца, входящего в состав такого парного дефекта, должен быть близок по своему значению к g -фактору свободного электрона 2.0023, а структура спектра отражать наличие 24 неэквивалентных, с точки зрения симметрии кристаллического окружения, соседних атомов по кристаллической решетке [8]. В эксперименте наблюдается от 18 до 21 компоненты тонкой структуры спектра, что, по всей видимости, обусловлено недостаточным разрешением экспериментальной аппаратуры, с одной стороны [7], и характером наблюдаемого спектра — с другой (рис. 3).

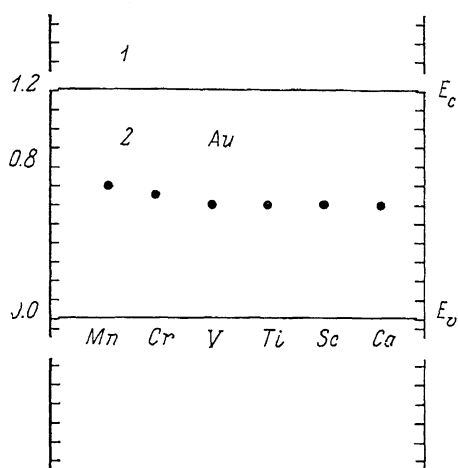


Рис. 4. Энергетические уровни, связанные с перезарядкой электронных ловушек (1), проявляющиеся при легировании (2) кремния различными 3d-элементами [9].

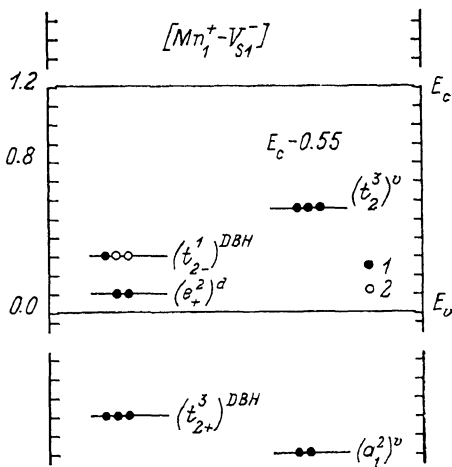


Рис. 5. Электронная структура дефекта ($Mn_4^+ - V_{Si}^-$) и локальный уровень, связанный с его перезарядкой.

Здесь и далее на рисунках показаны начальные состояния системы: заполненные одноэлектронные состояния (1), пустые одноэлектронные состояния (2).

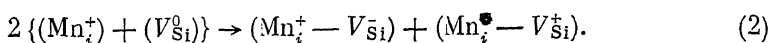
В пользу выдвинутой гипотезы о структуре центра с энергией активации $E_c - 0.55$ эВ свидетельствует также тот факт, что в результате сравнительно низкотемпературного отжига (температура отжига ~ 250 °C) в спектрах DLTS вновь появляется сигнал от центра с энергией активации $E_c - 0.42$ эВ [1]. Принимая во внимание, что в результате такого процесса концентрация этих центров возвращается практически к первоначальному значению [1], связывать его с распадом кластера $(Mn_4^+)_4$ на изолированные центры затруднительно. Разность в энергии активации таких центров (Mn_4^0 и $[Mn_4^+ - V_{Si}^-]$), согласно выполненным оценкам [1], составляет ~ 0.13 эВ.

Локализованное состояние $E_c - 0.55$ эВ в рамках рассматриваемой модели двойного дефекта связано с перезарядкой вакансии кремния V_{Si}^- , но не изолированной, а входящей в состав парного дефекта, что и обуславливает «универсальность» наблюдаемого уровня в запрещенной зоне независимо от элемента, входящего в состав такого дефекта в качестве второго партнера. Экспериментально этот эффект был обнаружен при исследовании кремния, легированного различными примесями [9], но интерпретирован авторами этой работы как уровни, связанные с перезарядкой примесных пар с участием атомов золота (рис. 4).

Интересно отметить, что предпринятые недавно исследования центра, образующегося в кремнии с высоким удельным сопротивлением при медленном охлаждении образцов и идентифицированного ими как кластер $(Mn_4^0)_4$, с помощью метода спинового резонанса [6] позволили уточнить

значение величины константы тонкого взаимодействия a_{exp} , а также знак константы сверхтонкого взаимодействия A_{exp} . Принимая во внимание, что A_{exp} оказывается отрицательной, возникает вопрос (в свете обсуждения выше этого параметра для центров внедрения Mn_i) об электронной структуре d -остова такого комплекса и величине магнитного момента, локализованного на центре. В рамках модели кластера, состоящего из четырех антиферромагнитно-связанных ионов марганца, этот вопрос, по нашему мнению, практически неразрешим. Отметим, что вид спектральной зависимости сигнала фото-ЭПР таких центров от энергии возбуждающего кванта, полученный авторами этой работы, хорошо согласуется с литературными данными [7].

Возвращаясь теперь к распаду центра Mn_i^+ , мы можем написать, что схема распада данного метастабильного состояния выглядит следующим образом:



Второе зарядовое состояние такого парного дефекта получается из условия сохранения суммарного числа электронов, локализованных на орбиталях типа t_2 до и после образования парного дефекта из двух точечных дефектов (междоузельного центра марганца и вакансии кремния).

Электронная структура центра $[\text{Mn}_i^+ - \text{V}_{\text{Si}}^-]$ изображена на рис. 5. При этом двойной дефект в зарядовом состоянии $[\text{Mn}_i^+ - \text{V}_{\text{Si}}^-]$ легко идентифицируется с центром, рассматривавшимся ранее как примесная пара $[\text{Mn}_i^+ - \text{B}_i^-]$, которая образуется при медленном охлаждении образцов кремния с дырочным типом проводимости, легированных марганцем [4].

Тригональная симметрия кристаллического окружения таких центров обусловлена кулоновским взаимодействием партнеров, входящих в состав двойного дефекта (псевдоэффект Яна—Теллера). В зависимости от того, к какой электронной конфигурации ближе состояние дефекта $[\text{Mn}_i^+ - \text{V}_{\text{Si}}^-]$ или $[\text{Mn}_i^+ - \text{V}_{\text{Si}}^+]$, центр будет иметь либо ромбоэдрическую, либо тригональную симметрию кристаллического окружения.

2. Центры замещения: модель и ее обсуждение

Третий, и последний, сорт двойных дефектов с участием примесных ионов марганца, для которых характерно сильное взаимодействие с вакансией (V_{Si}), — это примесные центры марганца, прорекомбинировавшие с вакансией (Mn_s -центры замещения). Иными словами, мы будем рассматривать двойной дефект, в котором вакансия существует лишь фиктивно: примесный центр в этом случае локализован в пределах первой координационной сферы вакансии кремния и расстояние между партнерами σ отлично от нуля только тогда, когда мы имеем дело с ян-теллеровскими центрами; во всех остальных случаях примесный ион занимает позицию в узле кристаллической решетки и расстояние σ между партнерами равно нулю, а вакансия имеет чисто виртуальный характер.

Рассмотрение таких центров с позиций двойного дефекта приводит к качественно новым результатам, обусловленным тем, что такой двойной дефект сохраняет ряд свойств, характерных для изолированной вакансии кремния, в частности свойства центра с отрицательной U , для зарядового состояния вакансии V_{Si}^+ . Кроме того, в отличие от центров внедрения (примесный атом слабо взаимодействует с кристаллическим окружением; см. выше), когда электроны примесного центра заполняют только орбитали типа $(t_2)^{\text{ДВН}}$ и $(e_+)^d$, в случае центров замещения электроны могут локализовываться как на антисвязывающих орбиталях типа $(t_2)^{\text{ДВН}}$, так и на связывающих орбиталях, преобразующихся по представлению симметрии t_2 .

Для связывающей компоненты t_2 -орбиталей по аналогии с орбиталями $(t_2)^{\text{ДВН}}$ мы введем обозначения $(t_2)^{\text{ВВН}}$ (valance band hybride — гибри-

дизированные валентные связи), волновая функция которых может быть представлена в виде

$$|t_2\rangle^{VBH} = \alpha |t_2\rangle^v + \beta |t_2\rangle^d. \quad (3)$$

Центры замещения образуются, когда в процессе легирования кремния марганцем генерируются вакансии с концентрацией, превышающей равновесную при данной температуре. Специальный прием, позволяющий реализовать такую ситуацию, связан с введением вместе с примесью марганца ионов меди, которые, согласно [10], позволяют активно генерировать вакансии. При этом в зависимости от типа проводимости исходного кристалла, используемого для легирования, реализуются различные зарядовые состояния примесного центра марганца, входящего в состав двойного дефекта, как это следует из измерений спектров ЭПР на примесных ионах марганца в таких кристаллах [10, 11].

Рассмотрим ситуацию, когда в качестве исходного материала для легирования используется кремний с днрочным типом проводимости. Исследование спинового резонанса в таких системах было выполнено авторами работы [10], а совместно ЭПР и спектров DLTS авторами работы [11].

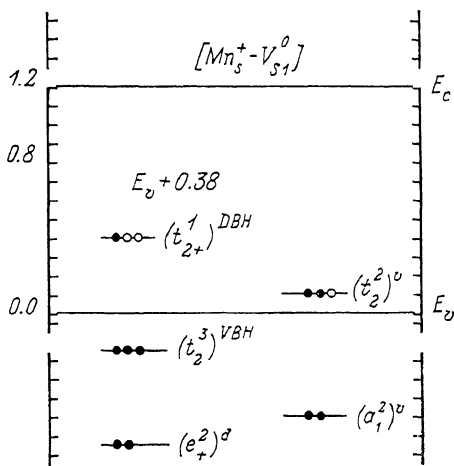


Рис. 6. Электронная структура дефекта $[Mn_s^+ - V_{Si}^0]$ и локальный уровень, связанный с его перезарядкой.

Исследование спектров ЭПР в таких образцах показывает, что наблюдается центр, характеризующийся следующими параметрами:

$$J = S = 1, \quad L = 0,$$

$$g_{\text{exp}} = 2.0259 \pm 0.0001,$$

$$A_{\text{exp}} = -63.0 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}. \quad (4)$$

Принимая во внимание, что такие центры имеют тетраэдрическую симметрию кристаллического окружения и не наблюдаются в контрольных образцах, авторы названных выше работ справедливо предположили, что центр, ответственный за появление такого спектра ЭПР, не может быть ничем иным, как примесным ионом марганца в позиции замещения, неспаренные электроны которого заполняют состояния, преобразующиеся по e -представлению симметрии, т. е. данный центр представляет собой однократно ионизированное состояние Mn_s^+ ($(e_+^2)^d$) или $[Mn_s^+ - V_{Si}^0]$. Однако при этом не учитывалось, что вакансия кремния обладает необычными свойствами и в зависимости от положения уровня Ферми E_F в запрещенной зоне устойчивыми зарядовыми состояниями вакансии кремния будут либо V_{Si}^0 ($E_F \geq E_v + 0.05$ эВ), либо V_{Si}^{+} ($E_F < E_v + 0.05$ эВ) [12, 13].

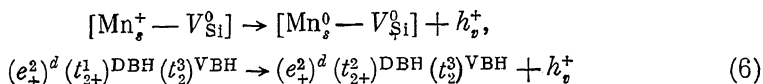
Анализ условий эксперимента, результаты которого приведены в работе [11], показывает, что при охлаждении образцов до температур $T \sim 4.2$ К положение уровня Ферми в системе будет определяться мелкой примесью бора, содержащейся в исходном кристалле для легирования, т. е. устойчивым зарядовым состоянием вакансии кремния, входящей в состав двойного дефекта, будет V_{Si}^{+} . Поэтому примесный центр марганца, наблюдаемый при исследовании спектров ЭПР таких образцов, следует идентифицировать как $[Mn_s^+ - V_{Si}^{+}]$ (электронная конфигурация $\{(e_+^2)^d (t_{2+}^3 t_{2-}^3)^{VBH} - (a_1^2)^v\}$).

При повышении температуры образца зарядовое состояние $[\text{Mn}_s^- - \text{V}_{\text{Si}}^+]$ такого двойного дефекта становится неустойчивым, и в результате перераспределения электронной плотности внутри такого дефекта устойчивым будет другое состояние $[\text{Mn}_s^+ - \text{V}_{\text{Si}}^0]$. Условие такого перехода

$$E_F > E_v + 0.05 \text{ эВ}, \quad (5)$$

электронная конфигурация центра $[\text{Mn}_s^+ - \text{V}_{\text{Si}}^0]$ может быть записана в виде $\{(e_+^2)^d (t_{2+}^1)^{\text{ДВН}} (t_2^3)^{\text{ВВН}} - (a_1^2 t_2^4)^v\}$.

Принимая во внимание сказанное выше, легко понять природу локализованного состояния $E_v^+ 0.38 \text{ эВ}$, проявляющегося в спектрах DLTS таких образцов [11]. В рамках рассматриваемой модели его следует связать с перезарядкой примесных ионов марганца, входящих в состав двойного дефекта (рис. 6)



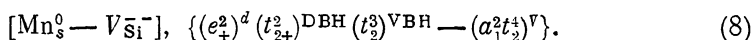
(ср. с (10) в [2]).

Два других парамагнитных состояния двойного дефекта, в котором примесный ион марганца занимает позицию в пределах первой координатной сферы вакансии, реализуются при использовании в качестве исходных образцов для легирования пластин кремния с электронным типом проводимости.

Как и в рассмотренном выше случае, наряду с марганцем в такие образцы вводятся ионы меди для интенсивной генерации вакансий. Исследования спинового резонанса на таких образцах показало, что примесные центры марганца имеют тетраэдрическую симметрию кристаллического окружения, а их спектр ЭПР описывается следующими параметрами:

$$\begin{aligned} J = S &= 5/2, \quad L = 0, \\ g_{\text{exp}} &= 2.0058 \pm 0.0001, \\ a_{\text{exp}} &= +26.5 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}, \\ A_{\text{exp}} &= -40.5 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}. \end{aligned} \quad (7)$$

Принимая во внимание, что симметрия кристаллического окружения примесного центра марганца, входящего в состав такого двойного дефекта, описывается точечной группой симметрии T_d , можно было бы предположить, что вакансия, входящая в состав такого дефекта, находится в зарядовом состоянии V_{Si}^- , а примесный ион марганца Mn_s^0 , т. е. данный дефект имеет вид



Однако в силу того, что число электронов, заполняющих орбитали, преобразующихся по одному и тому же представлению симметрии t_2 , примеси и вакансии, не может различаться более чем на единицу (вакансии кремния в зарядовом состоянии V_{Si}^- и V_{Si}^0 являются центрами с положительной энергией кулоновской корреляции в отличие от центров V_{Si}^+ ; см. также определение $|t_2^{\text{ВВН}}|$ и $|t_2^{\text{ДВН}}|$ [2]), мы получаем, что электронная конфигурация данного дефекта должна быть ближе к $[\text{Mn}_s^- - \text{V}_{\text{Si}}^-] - \{(e_+^2)^d (t_{2+}^3)^{\text{ДВН}} (t_2^3)^{\text{ВВН}} - (a_1^2 t_2^4)^v\}$, чем к (8).

В пользу такой записи зарядового состояния партнеров, образующих двойной дефект, свидетельствует также и тот факт, что константа тонкого взаимодействия e_{exp} для такого центра отлична от нуля, т. е. имеет место перенос заряда с примесного центра на лиганды в отличие от случая $[\text{Mn}_s^- - \text{V}_{\text{Si}}^+]$, когда электроны с ближайших лигандов переносятся на примесный центр (см. обсуждение этого центра выше).

Зарядовое состояние такого двойного дефекта $[Mn_s^- - V_{Si}^-]$ отличается от рассмотренного выше центра $[Mn_s^0 - V_{Si}^0]$ по величине заряда на 2, т. е. в кинетических измерениях должен проявляться уровень, связанный с перезарядкой состояния $[Mn_s^0 - V_{Si}^-]$.

Несмотря на то что на образцах $Si\langle Mn+Cu+P \rangle$ такие исследования не проводились, мы можем с определенной долей уверенности утверждать, что перезарядке центра $[Mn_s^0 - V_{Si}^-]/[Mn_s^0 - V_{Si}^0]$ отвечает локализованное состояние $E_c - 0.28$ эВ (эффект Холла) [14], $E_c - 0.31$ эВ (DLTS) [1], слабый пик которого детектируется в спектрах DLTS в образцах $Si\langle Mn+P \rangle$, подвергнутых наиболее интенсивной закалке из образцов одной серии [3]. Это утверждение хорошо согласуется с экспериментальными данными, полученными при изучении центров внедрения, для которых характерно слабое взаимодействие со вторым партнером, если рассматривать их с позиций двойного дефекта.

Действительно, в том случае, если уровень Ферми в системе примесь + матрица лежит выше, чем $E_c - 0.13$ эВ, то на примесном центре и вакансии кремния должно быть локализовано 13 электронов (сумма по примесным и зонным состояниям), а при выполнении условия $E_F > E_c - 0.42$ эВ ([2] см. (18)) — 11 электронов, т. е. двойной дефект в зарядовом состоянии $[Mn_s^0 - V_{Si}^-]$, насчитывающем 12 электронов, может существовать в том случае, если уровень Ферми в системе примесь + матрица расположен в запрещенной зоне не выше, чем 0.13 эВ от дна зоны проводимости, но не ниже, чем 0.38 эВ над потолком валентной зоны, иными словами, при выполнении следующего условия:

$$E_c - 0.13 \text{ эВ} > E_F > E_c + 0.38 \text{ эВ}. \quad (9)$$

Вместе с тем ответственным за появление локализованного состояния $E_c - 0.28$ эВ в запрещенной зоне кремния в результате легирования его марганцем может быть также и центр $[Mn_i^0 - V_{Si}^-]$, насчитывающий, как и $[Mn_s^0 - V_{Si}^-]$, 12 электронов на примесных и зонных орбиталях. Положение локализованного состояния, связанного с перезарядкой такого примесного состояния, в настоящее время не определено.

Дальнейшие исследования такой системы позволят, на наш взгляд, ответить на ряд вопросов, оставшихся неясными к настоящему моменту.

3. Обсуждение результатов

Рассмотренная в настоящей работе модель примесного центра марганца в кремнии позволяет, как это было показано выше, с позиций единой модели объяснить все характерные особенности кристаллов, получаемых в результате легирования кремния ионами марганца.

Показано, что в зависимости от типа проводимости кристаллов, используемых для легирования, примесные ионы могут находиться в различных зарядовых состояниях, но их число существенно меньше, чем это предполагалось ранее, и равно 4: Mn^{++} , Mn^+ , Mn^0 , Mn^- . Большое число энергетических уровней в запрещенной зоне кремния, возникающих в результате легирования его марганцем, при этом обусловлено наличием трех видов взаимодействия примесных ионов марганца с кристаллической решеткой.

1. Слабое взаимодействие с кристаллической решеткой (малое перекрытие волновых функций валентных электронов примесного центра и кристаллической матрицы (центры внедрения)).

2. Промежуточное по своей силе взаимодействие с атомами кристаллической матрицы реализуется при насыщении только одной валентной связи, в то время как сам примесный ион занимает позицию ко второй координационной сфере по отношению ко второму партнеру, входящему в состав двойного дефекта с участием примесного иона марганца (парные дефекты).

3. Сильное взаимодействие с ближайшими соседями по кристаллической решетке, когда примесный ион занимает позицию в пределах первой координационной сферы вакансии, входящей в состав двойного дефекта (центры замещения).

Показано, что привлечение представлений о двойном дефекте позволяет дать правильную интерпретацию величины и знака константы сверхтонкого взаимодействия A , имеющей разные знаки для центров, основное состояние которых в результате взаимодействия атомных термов с внутрикристаллическим полем полупроводниковой матрицы остается либо вырожденным по орбитальному квантовому числу L , либо нет.

Физический смысл предлагаемой интерпретации связан с тем, что происходит не «замораживание» орбитальной компоненты L полного углового момента J , а гибридизация $3d$ -состояний примесного иона с p -состояниями кремния, в результате чего происходит «размытие» волновой функции состояния типа $(t_2)^{D_{2h}}$, и, как следствие, значительное уменьшение константы спин-орбитального взаимодействия.

В заключение автор считает своим долгом выразить благодарность К. А. Кикоину за стимулирование дискуссии, а М. К. Шейкману за замечания по рукописи.

Список литературы

- [1] Lemke H. // Phys. Stat. Sol. (a). 1981. V. 64. N 2. P. 549.
- [2] Yakubenyu S. // Препринт ИАЭ. 4812/9.
- [3] Абдурахманов К. П., Лебедев А. А. и др. // ФТП. 1985. Т. 19. № 2. С. 213—216.
- [4] Людвиг Г., Вудбури Дж. // Сб. «Электронный парамагнитный резонанс». М.: Мир, 1964. С. 223.
- [5] Carlson R. O. // Phys. Rev. 1956. V. 104. N 4. P. 937—945.
- [6] Kressl J., Gehlhoff W. // Phys. Stat. Sol. (b). 1988. V. 145. N 2. P. 609—617.
- [7] Фистуль В. И. и др. // ФТП. 1982. Т. 16. № 5. С. 939—943.
- [8] Sprenger M., van Kemp R., Sieverts E. G., Ammerlaan C. A. G. // Phys. Rev. 1987. V. 35B. P. 1582—1603.
- [9] Kimerling L. C., Benton J. L., Rubin J. J. // Proc. 11th Conf. on defect and Radiation Effect in Semiconductors / Ed. R. R. Hasiguti. IOP. London, 1981.
- [10] Ludwig G., Woodbury H. // Phys. Rev. Lett. 1960. V. 5. N 1. P. 96.
- [11] Czaputa R. et al. // Phys. Rev. Lett. 1985. V. 55. N 7. P. 758—761.
- [12] Newton J. L. et al. // Physica B+C. 1983. V. 116B. P. 219.
- [13] Baraff G. A., Kane E. C., Shlutter M. // Phys. Rev. 1980. V. 21B. N 12. P. 5662—5682.
- [14] Czaputa R., Feichtinger H., Oswald J. // Sol. St. Comm. 1983. V. 47. N 4. P. 223—228.

Институт атомной физики
им. И. В. Курчатова
Москва

Поступило в Редакцию
27 августа 1990 г.
В окончательной редакции
28 ноября 1990 г.