

ХАРАКТЕР ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИМПЛАНТИРОВАННОГО В КРЕМНИЙ ГЕЛИЯ С АТОМАМИ РЕШЕТКИ

Босак В. И., Жевно А. Н., Стельмах В. Ф.

Для идентификации парамагнитных дефектов в полупроводниках обычно используются экспериментальные данные по сверхтонкому взаимодействию (СТВ) s - и p -электронов с ядерным спином собственного атома [1, 2]. Дополнительное СТВ этих электронов с ядерными спинами соседних атомов может быть использовано для более глубокого изучения дефектов [3, 4]. В этом случае параметры тензора СТВ зависят от основных характеристик дефекта — относительного расположения атомов, расстояний между ними и взаимной ориентации p -орбиталей. Поэтому расчет параметров тензора СТВ в зависимости от указанных характеристик позволяет получить соответствующую новую информацию о дефектах и, в частности, дополнить метод ЭПР возможностью метода двойного электронно-ядерного резонанса по определению положения магнитных ядер в кристаллической решетке.

В [5] в кремнии, имплантированном ионами ${}^3\text{He}$, обнаружен парамагнитный центр Si—A46 [электронный спин $S=1$, изотропная и анизотропная составляющие СТВ с ядром ${}^3\text{He}$ соответственно равны $a(\text{He})=-5.5$ и $b(\text{He})=-0.5$ в единицах 10^{-4} см $^{-1}$], который, как полагают авторы, является комплексом вакансии—гелий с расположением атома гелия на оси ковалентной связи. Особенностью этого центра является анизотропия тензора СТВ электронного спина с ядром ${}^3\text{He}$, хотя гелий имеет только $1s$ -электроны, и СТВ должно быть изотропным. Расчет показал, что возможная примесь $2p$ -состояний гелия в резонансной волновой функции дает анизотропию СТВ на несколько порядков меньше наблюдаемой. Таким образом, анизотропия СТВ электронного спина с ядром ${}^3\text{He}$ обусловлена только взаимодействием $3s$ - и $3p$ -электронов кремния с ядром ${}^3\text{He}$.

В настоящей работе рассчитан со слейтеровскими волновыми функциями тензор магнитного диполь-дипольного СТВ $3s$ - и $3p$ -электронов атомов кремния с ядром ${}^3\text{He}$ для различных конфигураций комплекса вакансии—гелий в зависимости от положения в решетке атомов кремния и гелия. Согласно с результатами [5] получено для модели комплекса с симметрией C_{2v} и расположением атома гелия на оси [100] (рис. 1).

Для описания комплекса в качестве базисных взяты волновые функции для атомов Si_{1-4} — соответственно ориентированные гибридные слейтеровские $3s$ - и $3p$ -орбитали $\varphi_k = \alpha_k \varphi_{3s}(\text{Si}_k) + \beta_k \varphi_{3p}(\text{Si}_k)$, $\alpha_k^2 + \beta_k^2 = 1$; для атома гелия — слейтеровская орбиталь φ_{1p} . Молекулярные орбитали (МО) комплекса Ψ , преобразующиеся по неприводимым представлениям группы симметрии C_{2v} , показаны на рис. 1.

Тензор $A_{ij}(\text{He})$, описывающий анизотропное СТВ электронного спина с ядром ${}^3\text{He}$, находится из выражения

$$S_i A_{ij}(\text{He}) I_j = \int \Psi^2(1, 2) [h(\text{He}, 1) + h(\text{He}, 2)] d\tau(1) d\tau(2), \quad (1)$$

$$\text{где} \quad \Psi(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_3(1) \Psi_4(2) - \Psi_3(2) \Psi_4(1)] \quad (2)$$

— резонансный двухэлектронный слейтеровский детерминант,

$$h(\text{He}) = g_0 g_N(\text{He}) \mu_B \mu_N \frac{1}{r^3} \left[\frac{3}{r^2} (\mathbf{rS}) (\mathbf{rI}) - \text{SI} \right] \quad (3)$$

— одноэлектронный гамильтониан магнитного диполь-дипольного СТВ, где r — расстояние между неспаренным электроном и ядром ${}^3\text{He}$.

Анизотропное СТВ с ядром ${}^3\text{He}$ рассматривалось для $3s$ - и $3p$ -электронов атомов Si_{3-2} , так как в [5] СТВ с ядрами ${}^{29}\text{Si}_{3-4}$ не обнаружено. Расчет в [1]

членов для смешанных состояний и пропорциональных интегралам перекрывания показал, что они малы. Вклад $3s$ -электронов в A_{ij} (He) не превышал 0.06 вклада $3p$ -электронов. Поэтому здесь представлена зависимость A_{ij} (He) от положения атома гелия на оси [100], обусловленная только $3p$ -электронами и вычисленная по следующему выражению из (1):

$$S_i A_{ij}(\text{He}) I_j = 4\gamma_{3p}^2 \eta_4^2 \beta^2 \int [\varphi_{3p}^2(\text{Si}_1) + \varphi_{3p}^2(\text{Si}_2)] h(\text{He}) d\tau. \quad (4)$$

Вычисление (4) проводилось по полученным нами точным аналитическим выражениям, которые в отличие от [3] имеют ковариантную форму и позволяют

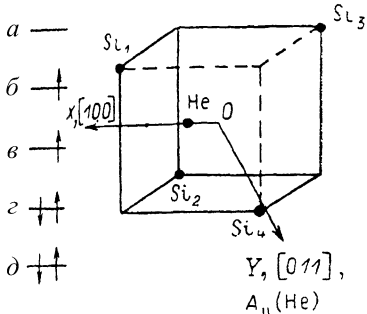


Рис. 1. Молекулярные орбитали и модель комплекса вакансия—гелий в кремнии.

$$\begin{aligned} a - \Psi_1 &= \eta_5 (\varphi_3 - \varphi_4), & b - \Psi_4 &= \eta_4 (\varphi_1 - \varphi_2), \\ c - \Psi_3 &= \eta_3 (\varphi_1 + \varphi_2) + \lambda_3 \varphi_{1s} + \lambda_6 (\varphi_3 + \varphi_4), \\ d - \Psi_2 &= \eta_2 (\varphi_3 + \varphi_4) + \lambda_3 (\varphi_1 + \varphi_2) + \lambda_4 \varphi_{1s}, \\ e - \Psi_5 &= \eta_1 \varphi_{1s} + \lambda_1 (\varphi_1 + \varphi_2) + \lambda_2 (\varphi_3 + \varphi_4). \end{aligned}$$

существенно сократить объем вычислений. В результате из (4) получено выражение

$$A_{ij}(\text{He}) = \frac{2}{5} \varepsilon_0 g_{\mathbf{N}}(\text{He}) \mu_{\mathbf{N}} \mu_{\mathbf{N}} 4\gamma_{3p}^2 \eta_4^2 \beta^2 \frac{\gamma_{3p}^3}{15a_0^3} f_{ij}(\varphi_{3p}^2), \quad (5)$$

где γ_{3p} — слейтеровский параметр $3p$ -орбитали, a_0 — боровский радиус.

Зависимость тензора $f_{ij}(\varphi_{3p}^2)$ от положения атома гелия на оси $X \parallel [100]$ представлена на рис. 2. При расчете тензора $f_{ij}(\varphi_{3p}^2)$ считалось, что атомы Si_{1-2} в соответствии с [6] смещены из узлов на 0.021 нм по осям разорванных связей в сторону от вакантного узла. По данным [5] получено, что $\beta^2 = \beta_{1,2}^2 = 0.88$, $4\gamma_{3p}^2 \eta_4^2 = 0.29$.

Экспериментальным данным [5] удовлетворяет только положение атома гелия на оси X в окрестности точки $X = 0.08$ нм, где $f_{ij}(\varphi_{3p}^2)$ аксиально симметричен вдоль оси $Y \parallel [011]$. Рассчитанное из (5) в этой точке значение $(1/2) A_{ij}(\text{He})$ совпадает с экспериментальным значением $b(\text{He}) = -0.5 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ при $\gamma_{3p} = 0.902$.¹ Отметим, что изменения в широких пределах величины смещения из узлов атомов Si_{1-2} и величины γ_{3p} не влияют на качественный характер результатов. Для λ_5^2 (s -характера гелия, характеризующего его химическую активность) получено значение 0.006.

Таким образом, из полученных результатов однозначно следует, что комплекс вакансия—гелий в кремнии имеет симметрию C_{2v} , атом гелия расположен на оси [100], и, следовательно, в комплексе образуется связь $\text{Si}_1 - \text{He} - \text{Si}_2$ ($\text{MO } \Psi_3$).

¹ В [3] используется $\alpha_p = 2\gamma_{3p}$.

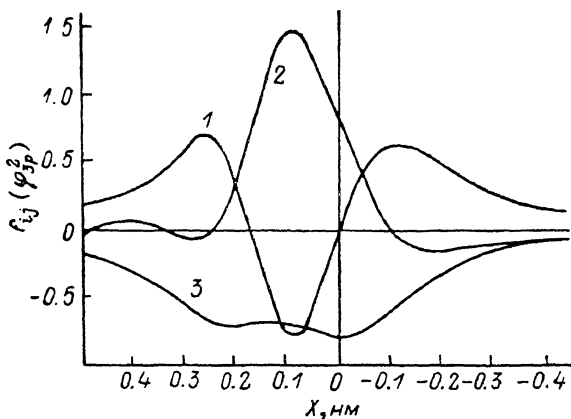


Рис. 2. Зависимость главных значений тензора $f_{ij}(\varphi_{3p}^2)$ от положения атома гелия на оси X .

Начало отсчета совмещено с вакантным узлом. 1 — f_{xx} , 2 — f_{yy} , 3 — f_{zz} .

- [1] Corbett J. W., Bourgoin J. C., Cheng L. J. // Rad. Eff. Semicond. London—Bristol, 1977. P. 1—11.
- [2] Глянецук М. Д., Грачев В. Г., Дейген М. Ф., Ройныи А. Б., Суслин Л. А. Электрические эффекты в радиоспектроскопии. М., 1981. 332 с.
- [3] Ammerlaan C. A. J., Wolfrat J. C. // Phys. St. Sol. (b). 1978. V. 89. N 2. P. 541—544.
- [4] Ammerlaan C. A. J., Wolfrat J. C. // Phys. St. Sol. (b). 1978. V. 89. N 1. P. 85—94.
- [5] Горелкинский Ю. В., Невинный Н. Н., Аязбаев С. С. // Working meeting on ion implantation in semiconductors and other materials and ion beam devices. Balatonaliga, 1981. P. 112—113.
- [6] Жевно А. И., Сидорик В. В., Ткачев В. Д. // ФТП. 1976. Т. 10. В. 5. С. 1022.

Белорусский государственный университет
им. В. И. Ленина
Минск

Получено 10.05.1989
Принято к печати 4.11.1989

ФТП, том 24, вып. 3, 1990

МИКРОВОЛНОВЫЙ ЦИКЛОТРОННЫЙ РЕЗОНАНС В ЧИСТЫХ КРИСТАЛЛАХ GaAs

Ашкинадзе Б. М., Бельков В. В., Красинская А. Г.

Циклотронный резонанс (ЦР) является эффективным методом изучения зонной структуры и транспорта носителей тока в полупроводниках. Ширина линии ЦР ΔH связана с временем релаксации импульса электрона τ_p соотношением $\omega\tau_p = 2H_c/\Delta H$, где ω — частота излучения, H_c — резонансное значение магнитного поля. Исследования ЦР в микроволновой области, когда $\hbar\omega < kT$, позволили подробно изучить механизмы рассеяния в Ge и Si; при этом значения подвижности, рассчитанные по величине $\omega\tau_p$, были близки к величине холловской подвижности [1, 2].

В кристаллах GaAs, насколько нам известно, классический ЦР ($\hbar\omega < kT$) не применялся для изучения транспортных явлений. Это, по-видимому, обусловлено трудностью получения достаточно чистых кристаллов, в которых могут быть выполнены условия наблюдения ЦР ($\omega\tau_p > 1$). Циклотронный резонанс в GaAs исследовался в ИК диапазоне в квантовом пределе ($\hbar\omega \gg kT$) [3]. В этом случае необходимая величина магнитного поля достаточно велика, так что циклотронный радиус электрона становится сравнимым с радиусом действия рассеивающих центров или меньше его. Процессы рассеяния электронов в условиях ЦР (при $\hbar\omega \gg kT$) существенно отличаются от случая $H=0$, и ширина линии ЦР не дает представления о подвижности электронов при $H=0$. Заметим, что ЦР в GaAs в 2-миллиметровом диапазоне при $T > 11$ К использовался для измерения эффективной массы [4], а в работе [5] наблюдался резонансное гашение люминесценции СВЧ полем в условиях ЦР.

В настоящей работе мы исследовали ЦР на неравновесных электронах в кристаллах GaAs в 8-миллиметровом диапазоне ($\hbar\omega = 0.16$ мэВ) при $T = 1.8 \div 4.2$ К. Были исследованы образцы GaAs, полученные газофазной эпитаксией [6]; наиболее узкие линии ЦР наблюдались в образцах, в которых в люминесценции отчетливо выделялась линия излучения свободного экситона [6]. Образец освещался модулированным на частоте $f = 100$ Гц светом He—Ne-лазера, носители генерировались в пятне размером не более 1 мм².

При плавном увеличении тока через соленоид на частоте модуляции свет регистрировался сигнал СВЧ поглощения (геометрия эксперимента показана на вставке к рис. 1). Уровень СВЧ мощности, поступающей в волноводный тракт с образцом, уменьшался до тех пор, пока линия ЦР не переставала сужаться: это достигалось при величине СВЧ мощности $P < 3 \cdot 10^{-5}$ Вт. Интенсивность фотовозбуждения (I) также выбиралась минимальной.