

03,08

Релаксация ядерных спинов ^{29}Si в микрокристаллах пластически деформированных образцов $\text{Si}:\text{B}$

© О.В. Коплак¹, Р.Б. Моргун^{1,2}

¹ Институт проблем химической физики РАН,
Черноголовка, Россия

² Московский государственный университет путей сообщения (МИИТ),
Москва, Россия

E-mail: morgunov2005@yandex.ru

(Поступила в Редакцию 26 марта 2015 г.
В окончательной редакции 9 июня 2015 г.)

Монокристаллы и микрокристаллы $\text{Si}:\text{B}$, обогащенные изотопом ^{29}Si , были исследованы методами ядерного магнитного резонанса и электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) в диапазоне температур 300–800 К. Установлено, что повышение температуры от 300 до 500 К приводит к смене кинетики релаксации насыщенной ядерной спиновой системы. При 300 К кинетика релаксации отвечает прямому электронно-ядерному взаимодействию с неоднородно распределенными парамагнитными центрами, введенными при пластической деформации кристаллов. При 500 К спиновая релаксация реализуется путем ядерной спиновой диффузии и электронно-ядерным взаимодействием с акцепторной примесью. Обнаружено влияние пластической деформации на спектры ЭПР при 9 К.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ (просекты 14-03-31004 и 13-07-12027).

1. Введение

Прецизионное управление системой взаимодействующих спинов, стимулирует развитие методов квантового компьютеринга [1,2]. Ядерный магнитный резонанс (ЯМР) и электронный парамагнитный резонанс (ЭПР), а также их комбинации открывают простой путь для хранения и обработки квантовой информации, а также инициализации (приготовления исходного состояния) квантовой спиновой системы [3,4]. Интенсивные исследования последних лет позволили сформулировать ясные условия реализации критериев квантового компьютеринга (критериев Di Vincenzo) в спиновых системах [1]. Наиболее впечатляющие успехи были достигнуты в кристаллах кремния, обогащенных магнитным изотопом ^{29}Si (ядерный спин $I_{\text{Si}} = 1/2$). Известно, что в кристаллах кремния, легированных фосфором ^{31}P , спиновыми состояниями можно управлять с помощью приложенного электрического поля [5], а считывание квантовой информации в ядерных цепочках ^{29}Si осуществлять с помощью ЯМР-и ЭПР-спектроскопии [6]. Большинство публикаций было посвящено низкотемпературной динамике спинов в кремнии ($\sim 1\text{--}10\text{ K}$), для которой методы ЭПР и ЯМР наиболее эффективны. В то же время исследование высокотемпературной динамики спинов в кремнии представляет значительный интерес, поскольку в температурном диапазоне 300–800 К средние энергии тепловых флуктуаций сравнимы с шириной примесной подзоны и энергиями связи электронов, что позволяет выявлять новые фундаментальные закономерности электронно-ядерных взаимодействий. Необычайно длительное время спин-решеточной релаксации ядерных спинов ^{29}Si (до нескольких часов при комнатной температуре [7])

и весьма длительное время спин-спиновой релаксации парамагнитных центров в кремнии (до 25 s при комнатной температуре в чистых образцах [7]) делает эти кристаллы весьма перспективными для квантового компьютера, поскольку устраняет проблему декогеренции состояний. Это преимущество вместе с совместимостью кремниевых кристаллов с классической электроникой делает актуальными исследования ядерной спиновой динамики в кристаллах ^{29}Si при высоких температурах. Ядерное диполь-дипольное взаимодействие [8] и электронно-ядерное взаимодействие со спинами парамагнитных дефектов [9] являются основными управляющими каналами квантового компьютеринга в полностью кремниевом устройстве. В последнее время основные усилия были сфокусированы на исследовании кристаллов $^{29}\text{Si}:\text{P}$ потому что в этой системе электронные и ядерные спины равны $1/2$, и теоретические расчеты их поведения относительно просты. Инженерия квантовых приборов на основе кристаллов $^{29}\text{Si}:\text{B}$ более сложна, поскольку спины дырок $S = 3/2$. Высокие значения ядерных спинов двух стабильных изотопов бора ^{10}B и ^{11}B ($I_{10\text{B}} = 3$ и $I_{11\text{B}} = 3/2$ соответственно), а также вклад спин-орбитального взаимодействия в расщепление подзон дырок на „легкие“ и „тяжелые“ дырки осложняют количественную оценку квантово-логических операций в таких системах. Однако именно это и делает привлекательной систему с высокими значениями спинов для экспериментального исследования, поскольку, согласно оценкам [6], следует ожидать усиления квантовой запутанности в кристаллах $^{29}\text{Si}:\text{B}$. Многие эксперименты, осуществляемые в кристаллах $^{29}\text{Si}:\text{B}$, были реализованы в условиях сильного легирования акцепторной примесью $> 10^{18}\text{ cm}^{-3}$, когда поведение носителей заряда

и их взаимодействие с ядрами имеет металлический характер [10–15]. В наших экспериментах были использованы слабо легированные бором ($2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$) кристаллы ^{29}Si . Кроме того, дополнительно было введено $\sim 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ парамагнитных деформационных дефектов, стимулирующих электронно-ядерные взаимодействия и изменяющих кинетику релаксации ядерных спинов. Новизна этой части исследований заключается также в том, что парамагнитные центры на дислокациях и точечных парамагнитных дефектах, генерируемых при деформации, являются хорошо локализованными, в отличие от донорных и акцепторных волновых функций, которые включают как орбитальные компоненты атомов бора, так и примесь волновой функции свободной частицы $\psi(x, t) \sim A \exp(-(2\pi i/h)(Et - px))$ (h — константа Планка, E — энергия частицы, t — время, x — координата, p — импульс). Электронные и спиновые компоненты волновых функций деформационных дефектов в кремнии исследованы ранее в деталях [16–18], включая эффекты оптической поляризации спинов на дислокациях [19]. Представляется перспективным развитие квантовых вычислений и создание новых условий электронно-ядерного взаимодействия в сложной системе Si:B, содержащей многоуровневые спиновые состояния и парамагнитные центры с различной степенью локализации. Отметим, что электронные волновые функции доноров и акцепторов в кремнии „накрывают“ тысячи ядер, создавая естественный многоядерный кубит и обеспечивая высокоскоростное считывание квантовой информации с помощью методов электронного спинового резонанса, несмотря на медленную динамику ядерных спинов [8,9].

Цели данной работы заключались в исследовании ядерной спиновой динамики в изотопно-обогащенном кремнии ^{29}Si с акцепторной примесью В при высоких температурах 300–800 К и изучении вклада парамагнитных деформационных дефектов в электронно-ядерную спиновую динамику.

2. Методика

В экспериментах по исследованию спектров ЭПР использовались кристаллы кремния зонной плавки (FZ) Si размерами $1 \times 4 \times 16 \text{ mm}^3$ (длинная сторона имела ориентацию [110], плоскость $4 \times 16 \text{ mm}^3$ соответствовала плоскости (111)). В опытах по исследованию ЯМР были использованы микрокристаллические порошки со средним размером частиц $45 \mu\text{m}$. Кристаллы и микрокристаллы порошковых образцов были легированы бором (концентрация $2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$). Концентрации изотопов ^{28}Si , ^{29}Si and ^{30}Si были равны 10%, 75% and 15%, соответственно.

Спектры ЯМР были записаны с помощью спектрометра Bruker Avance III. Магнитное поле сверхпроводящего магнита 9.4 Т соответствовало резонансной частоте свободного ядра ^{29}Si $f = 79.5124 \text{ MHz}$. Относительное

отклонение частоты δ , возникавшее в результате химического сдвига и спин-спиновых взаимодействий, измерялись в ppm (10^{-6}f) и использовались для идентификации линий ЯМР спектра и механизмов взаимодействия ядерных спинов с окружением. Для нагрева образцов в спектрометре использовалась фирменная приставка Bruker, позволяющая исключить вариации параметров колебательных контуров, стабильность работы которых проверялась с помощью калибровочного образца. Последовательности радиочастотных 90° -импульсов имели длительность 5 ms. „Мертвое“ время задержки составляло 6.5 ms. Все спектры представляли собой действительную часть преобразования Фурье-сигнала свободной индукции. Пауза между записываемыми спектрами составляла 2 h, что было необходимо для релаксации ядерной намагниченности, за исключением серии опытов, где изучалась кинетика этой релаксации. Обработка спектров производилась с помощью программы Spectra MestreNova. В экспериментах по исследованию ЯМР были использованы порошкообразные образцы, полученные из монокристаллов, предварительно деформированных трехточечным изгибом при 950°C .

Чтобы регистрировать возникновение парамагнитных дефектов, индуцированное пластической деформацией, использовали ЭПР-спектрометр JOEL JES FA200, работающий в X-диапазоне при частоте 9.112 GHz. Частота модуляции составляла 100 kHz, а диапазон поля развертки 0–8 kOe. Микроволновая мощность не превышала $\sim 1 \text{ mW}$, что позволяло избежать насыщения переходов ЭПР. Температура 9 К поддерживалась с точностью $\pm 5\%$ в криостате ESR 900 Oxford Instruments. Низкотемпературные измерения были нужны потому, что спектры деформационных дефектов уширялись и становились нерегистрируемыми при температурах выше 40 К. Спектры ЭПР представляли собой зависимости первой производной поглощенной микроволновой мощности dP/dH от магнитного поля. Ориентация кристалла в резонаторе была выполнена с точностью $\pm 5^\circ$. При исследовании спектров ЭПР использовали как недеформированные, так и деформированные трехточечным изгибом при 950°C кристаллы Fz ^{29}Si , содержащие $\sim 10^8 \text{ cm}^{-2}$ дислокаций.

3. Результаты и обсуждение

3.1. Интерпретация спектров ЯМР. Спектр ЯМР микрокристаллического образца ^{29}Si при 300 К показан на рис. 1. В [8] было установлено, что в кристаллах с концентрацией изотопа ^{29}Si , превышающей $\sim 50\%$, наблюдаются гауссовы формы линий ЯМР, что согласовывалось с нашими данными, согласно которым аппроксимация спектра Гауссовыми линиями была точнее. ЯМР-спектры содержали четыре гауссовы линии с центрами при $-111.9 \pm 0.3 \text{ ppm}$, $-88.8 \pm 0.2 \text{ ppm}$, $-78.4 \pm 0.2 \text{ ppm}$, $-67 \pm 2 \text{ ppm}$ при $T = 300 \text{ K}$.

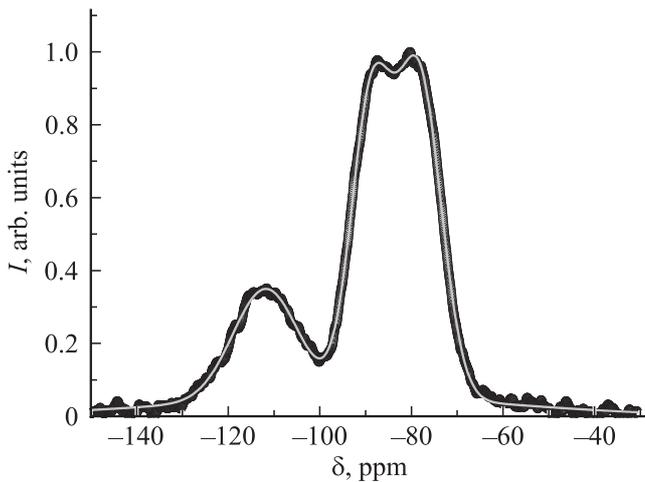


Рис. 1. Спектр ЯМР микрокристаллов ^{29}Si , записанный при 300 К. Сплошной линией показана аппроксимация спектра четырьмя Гауссовыми компонентами.

Химические сдвиги δ -различных соединений и состояний атомов кремния ^{29}Si хорошо известны. В четырехкоординированном кремнии они лежат в диапазоне от -60 до -120 ppm. С ростом числа соседних мостиковых атомов кислорода химический сдвиг уменьшается. Эти фракции кремния, окисленные в различной степени, обозначаются Q_n , где $n = 0-4$ [20]. Согласно литературным данным, пик при $\delta = -111.9 \pm 0.05$ ppm соответствует $n = 4$, т. е. сигналу оксида SiO_2 . Часть этого сигнала возникала из-за вклада кварцевого держателя, а другая его часть соответствовала окисленным слоям микрочастиц кремния.

Пара линий при -88.8 ppm и -78.4 ± 0.1 ppm соответствует дублету Пейка (Pake doublet) четырехкоординированных атомов ^{29}Si (рис. 1). Дипольное магнитное взаимодействие между соседними спинами ядер ^{29}Si является причиной расщепления этих линий. Расщепление линий дублета $\Delta\nu$ зависит от константы дипольного взаимодействия R^{DD} и угла Θ , между вектором \mathbf{r}_{ij} , соединяющим ядра, и приложенным магнитным полем H в соответствии с формулой [8]

$$\Delta\nu = 1/2 R_{jk}^{DD} (3 \cos^2 \Theta - 1), \quad R_{jk}^{DD} = \mu_0 \gamma_j \gamma_k \hbar / 4\pi \langle \mathbf{r}_{jk} \rangle. \quad (1)$$

В совершенных кристаллах кремния с симметрией кристаллической решетки T_d каждый атом кремния имеет тетраэдрическое окружение четырьмя соседними атомами. Все ядерные позиции эквивалентны, поскольку связи Si-Si ориентированы вдоль кристаллографического направления [111]. Поэтому эффектами анизотропии химического сдвига, равно как и квадрупольным взаимодействием для ядер ^{29}Si со спином $I_{\text{Si}} = 1/2$ можно пренебречь. Только прямое и косвенное магнитное дипольное взаимодействие ядер влияет на форму спектров ЯМР в монокристаллах кремния. Имеется два типа косвенных дипольных взаимодействий: дальнедействующее взаимодействие Рудермана-Киттеля-Катсуи-Йошиды

(RKKY) и короткодействующее скалярное взаимодействие (J -coupling). В исследуемых нами кристаллах концентрация носителей мала, поэтому вкладом RKKY взаимодействия, пропорционального квадрату плотности дырок, можно пренебречь. Прямое магнитное дипольное взаимодействие между двумя соседними спинами ядер ^{29}Si в монокристалле ^{29}Si (99%) создает взаимодействие ~ 1000 Hz [8], сравнимое с шириной линии в наших экспериментах 5 ppm (~ 400 Hz) с меньшей концентрацией магнитного изотопа (75%) (рис. 1). Дистанция между пиками $\delta = -88.8$ ppm и $\delta = -78.4$ ppm в дублете Пейка в порошке составляла $\Delta\nu/\nu = 10.4$ ppm, что согласно известному соотношению $\Delta\nu/\nu = 3R^{DD}/2$ отвечает величине $R^{DD} = 6.93$ ppm. В порошковом образце, где присутствуют все ориентации микрокристаллов по отношению к внешнему магнитному полю, можно ожидать небольших боковых линий, соответствующих ориентации микрочастиц $\Theta = 90^\circ$ [8,9]. Дистанция между этими пиками должна составлять $3R^{DD} = 20.8$ ppm, однако таких пиков не было обнаружено, вероятно, из-за их малой амплитуды. Вместо них один боковой пик с центром при $\delta = -67$ ppm был абсолютно необходим для правильной аппроксимации спектра. Его отсутствие при аппроксимации приводило к сильной асимметрии дублета Пейка, которая не должна наблюдаться в кристаллах кремния [8,9]. Можно предполагать, что пик при $\delta = -67$ ppm соответствует вкладу в ЯМР-спектр от аморфных приповерхностных слоев или областей, искаженных деформационными дефектами.

3.2. Кинетика ядерной спин-решеточной релаксации. Исследование спин-решеточной релаксации микрокристаллов ^{29}Si было проведено с помощью насыщения спиновой ядерной подсистемы сериями радиочастотных импульсов и последующим измерением намагниченности 90° -м импульсом, поступающим с задержкой по времени t (рис. 2, а). В полулогарифмических координатах зависимость $I(t)/I_0$ не была линейной (см. врезку на рис. 2, а), как должно было быть в случае экспоненциальной кинетики релаксации ядерной намагниченности $I(t)/I_0 = 1 - \exp(-t/T_1)$. Здесь I_0 — намагниченность в начальный момент времени $t = 0$, которую невозможно определить экспериментально и следует рассматривать как параметр, извлекаемый из аппроксимации.

В двойных логарифмических координатах зависимость $I(t)/I_0$ была прямой линией при $T = 300$ К (рис. 2, а). Отклонение процесса ядерной релаксации от экспоненциального закона, как известно, наблюдается только при малых временах установления намагниченности и определенных соотношениях между величинами барьера и радиуса спиновой диффузии. В этих случаях (при малых временах $t \rightarrow 0$) зависимость описывается формулой $I(t)/I_0 = 1 - (t/t_0)^\alpha \exp(-t/T_1)$ [21] и спрямляется в двойных логарифмических координатах. В этой формуле при малых t зависимость $I(t)/I_0$ подчиняется степенному закону, а при больших t — экспоненциальному [21]. Константа t_0 зависит от параметров спиновой диффузии

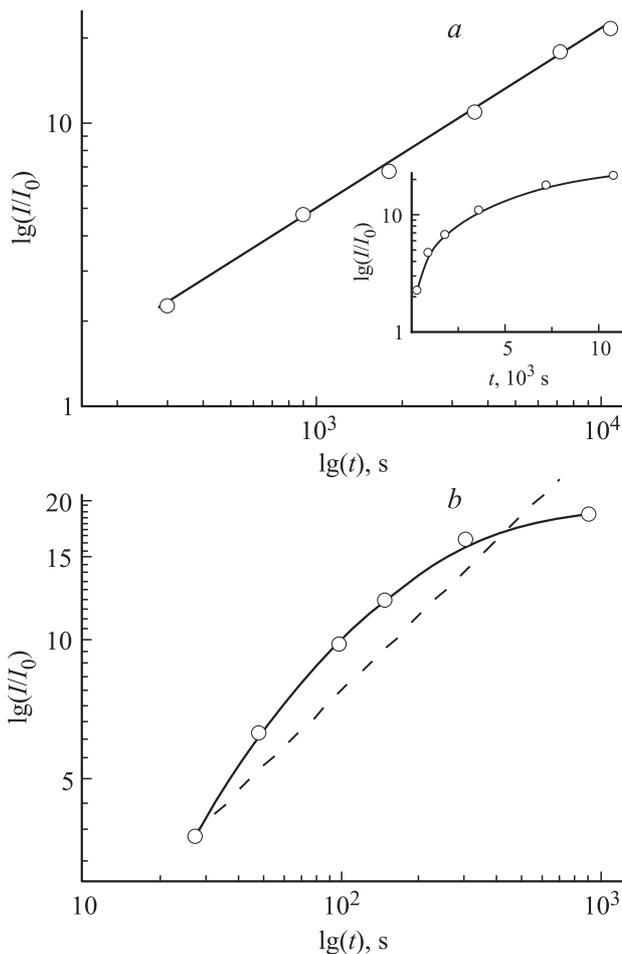


Рис. 2. (а) Временная зависимость ядерной спиновой намагниченности I , нормированной на ее значение в начальный момент времени I_0 в двойных логарифмических координатах при $T = 300$ К. Сплошная линия — аппроксимация функцией, пропорциональной произведению степенной и показательной функций (см. текст). На врезке показана та же зависимость в полулогарифмических координатах. (б) Временная зависимость ядерной спиновой намагниченности I , нормированной на ее значение в начальный момент времени I_0 в двойных логарифмических координатах при $T = 500$ К. Пунктирная линия — аппроксимация степенной функцией, сплошная линия — аппроксимация функцией, пропорциональной произведению степенной и показательной функций.

(величины барьера, радиуса и т.п.). Таким образом, при $T = 300$ К ядерная намагниченность в исследуемом диапазоне времен (> 2 h) не достигает равновесного значения.

При 500 К скорость спин-решеточной релаксации увеличивается по сравнению со скоростью при 300 К (рис. 2, б), однако зависимость $I(t)/I_0$ теперь не описывается ни чисто степенным законом, ни чисто экспоненциальной функцией. (Она не является прямой ни в логарифмических, ни в полулогарифмических координатах). Аппроксимация зависимости $I/I_0(t)$ функцией $I(t)/I_0 = 1 - (t/t_0) \exp(-t/T_1)$ при 300 К дала

параметры $\alpha = 0.64 \pm 0.03$, $t_0 = 80 \pm 2$ s при 300 К. При $T = 500$ К аппроксимация этой же функцией приводила к параметрам $\alpha = 0.2 \pm 0.01$, $t_0 = 12 \pm 1$ s и $T_1 = 3812 \pm 30$ s.

Ядерная спин-решеточная релаксация в кремнии протекает по двум конкурирующим каналам: прямая релаксация с помощью диполь-дипольного взаимодействия между ядерными спинами и спинами парамагнитных центров и косвенная релаксация с помощью ядерной спиновой диффузии. Последняя приводит к выравниванию температуры в ядерной спиновой подсистеме. Хотя быстрое вращение монокристаллического образца под магическим углом приводит к подавлению спиновой диффузии [22], в порошковых образцах этот эффект невозможен в силу разных ориентаций микрокристаллов. Прямая релаксация описывается степенной кинетикой [21,23], в то время как, косвенная релаксация, контролируемая спиновой диффузией обычно следует экспоненциальной кинетике для однородно распределенных парамагнитных ионов, либо описывается смешанной кинетикой для неоднородно распределенных парамагнитных дефектов [24]. Парамагнитные акцепторы, как правило, распределены однородно, в то время как деформационные дефекты обычно характеризуются существенно неоднородным распределением. Основываясь на этих закономерностях, можно предполагать, что в наших экспериментах при $T = 500$ К наблюдается одновременно прямая и косвенная кинетика релаксации, в то время как при $T = 300$ К доминирует электронно-ядерная релаксация. Отклонение параметра α от значения $1/2$, согласно [21] можно интерпретировать как геометрический эффект, свидетельствующий об анизотропии спиновой диффузии, которая в наших кристаллах могла бы быть вызвана линейными дефектами — дислокациями.

3.3. Температурная зависимость параметров спектра ЯМР. Концентрация дырок в кристаллах Si:V не изменяется значительно в диапазоне температур $T = 400$ – 800 К, потому что энергия термической ионизации атомов бора в кремнии 0.045 eV соответствует температуре 400 К, а внутренняя проводимость в кремнии дает вклад лишь при температурах выше 800 К. Поэтому выбранный температурный диапазон удобен для анализа спиновой динамики ядер без учета дополнительных факторов.

В наших экспериментах наблюдается довольно сильная температурная зависимость химического сдвига линий, отвечающих дублету Пейка, и практически не зависящий от температуры химический сдвиг оксида кремния (рис. 3, а). Оксид кремния в наших экспериментах поэтому служил дополнительным „калибровочным образцом“, свидетельствующим о том, что температурная зависимость остальных линий не может объясняться артефактами, связанными с расстройкой контуров спектрометра. Для описания температурной зависимости линий дублета Пейка мы использовали сначала описание

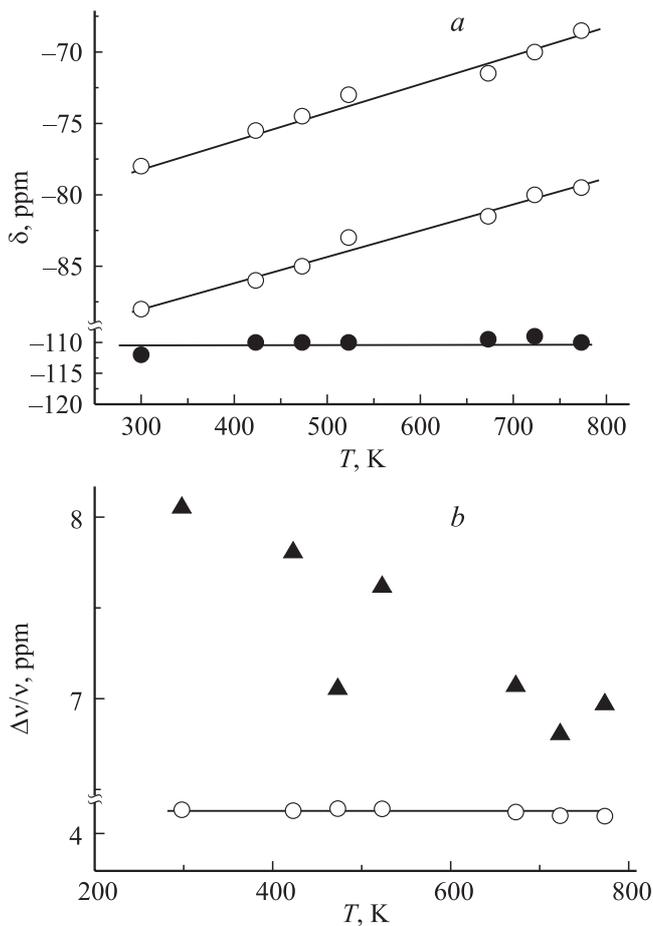


Рис. 3. Температурные зависимости химического сдвига δ (a) и ширин линий ЯМР $\Delta\nu/\nu$ (b) микрокристаллического образца ^{29}Si . Параметры дублета Пейка показаны светлыми символами, химический сдвиг SiO_2 показан темными кружками, ширина линии при $\delta = -67$ ppm показана темными треугольниками.

взаимодействия между спинами дырок и ядерными спинами в рамках теории Корринги, устанавливающей связь между химическим сдвигом $\Delta\nu/\nu$ и временем спин-решеточной релаксации T_1

$$(\Delta\nu/\nu)^2 T_1 = h/2\pi k_B T (\gamma_h/\gamma_n)^2, \quad (2)$$

здесь γ_h и γ_n — гиромагнитные отношения дырок и ядер, соответственно, k_B — постоянная Больцмана. Для дырок в ^{29}Si , фактор Корринги $(\Delta\nu/\nu)^2 T_1 T$ составляет $2.7 \cdot 10^{-5}$ sK, что в 4 раза больше, чем для электрона, поскольку гиромагнитное отношение для дырок вдвое больше электронного (это увеличивает вклад обсуждаемого канала релаксации). Подстановка значения $\Delta\nu/\nu$, отвечающего середине дублета Пейка в (2) приводит к значениям $T_1 = 13.5$ s при $T = 300$ K и $T_1 = 8$ s при $T = 500$ K. Эти значения значительно меньше величины T_1 , определенной из кинетики релаксации намагниченности $T_1 = 3812 \pm 30$ s.

Вероятно, в силу низкой концентрации акцепторов, взаимодействие Корринги не дает существенного вкла-

да в ядерную спиновую релаксацию, а температурная зависимость химического сдвига определяется иными факторами. Поскольку спектры ЯМР были получены в порошкообразном образце, подвергнутом предварительной пластической деформации, можно ожидать в нем большого количества деформационных и поверхностных дефектов, неоднородно распределенных в микро-частицах. Поэтому степенную компоненту релаксации можно объяснить вкладом неоднородно распределенных деформационных парамагнитных дефектов, а экспоненциальную компоненту ядерной релаксации — вкладом однородно распределенных акцепторов бора. Ширины линий ЯМР в дублете Пейка $\Delta\nu/\nu$ были равны друг другу и не зависели от температуры в диапазоне 300–800 K в противоположность пику при $\delta = -67$ ppm, ширина которого уменьшалась с ростом температуры (рис. 3, b).

3.4. Влияние пластической деформации на спектры ЭПР. Подтверждение присутствия парамагнитных деформационных дефектов было получено с помощью ЭПР-спектроскопии. Сравнение спектров ЭПР до и после пластической деформации обнаруживает появление дополнительных линий в деформированном кристалле (рис. 4).

Кристаллы кремния, легированные бором, содержат „тяжелые“ (с массой $0.49m_0$) и „легкие“ ($0.16m_0$) дырки (m_0 — масса свободного электрона) [14,15]. Эти дырки формируют две подзоны, расщепленные спин-орбитальным и Зеемановским взаимодействиями, как показано на рис. 4, a, где отмечены различные состояния $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$, $|4\rangle$. Несколько групп внутризонных и межподзонных ЭПР-переходов могут быть разделены на две серии: разрешенные переходы с изменением проекции спина $\Delta m = 1$ и запрещенные переходы $\Delta m = 2$ или 3, которые также обнаруживаются методом ЭПР [10–15]. На рис. 4, b показаны два спектра ЭПР при температуре $T = 9$ K, записанные в ориентации магнитного поля спектрометра вдоль $[110]$ в деформированных и недеформированных кристаллах $^{29}\text{Si}:\text{B}$. В этих спектрах легко обнаруживаются переходы, показанные на рис. 4, a. Согласно результатам группы К. Itoh [14,15] мы приписываем резонансы при $H = 3297$ Oe и $H = 3391$ Oe (линии 3, 4) суперпозиции двух межзонных переходов $\Delta m = 2$. Резонансы при $H = 5730$ Oe и $H = 6220$ Oe соответствуют межзонным переходам $\Delta m = 1$ ($|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$ и $|3\rangle \leftrightarrow |4\rangle$) и внутризонным переходам $\Delta m = 1$, $|2\rangle \leftrightarrow |3\rangle$ соответственно. Остальные линии, возникающие в результате деформации, не были ранее описаны в литературе. В [10–15] сообщалось о сходных сериях линий, возникающих в режиме измерения ЭПР в механически нагруженных кристаллах кремния, в то время как в наших опытах нагрузка в процессе измерения спектров ЭПР отсутствовала. В [10–15] сообщалось о центрах двух типов: центры со спинами $S = 1/2$, соответствующие так называемым „центральной линиям“ вблизи 3400 Oe, и другие центры с большими спинами

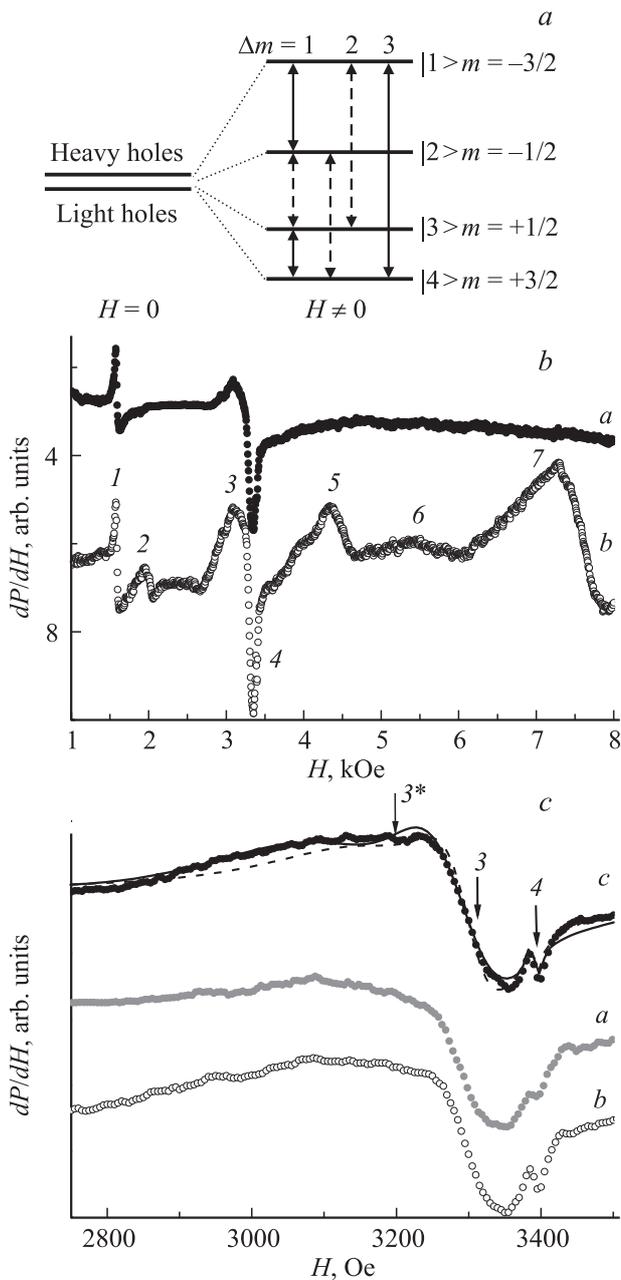


Рис. 4. (а) Схема разрешенных ($\Delta m = 1$) и запрещенных ($\Delta m = 2, 3$) переходов ЭПР между спиновыми уровнями „легких“ и „тяжелых“ дырок в кристаллах Si:B. (б) Спектры ЭПР недеформированного (а) и деформированного (б) монокристалла $^{29}\text{Si}:\text{B}$ в ориентации магнитного поля перпендикулярно направлению $[110]$ при $T = 9\text{ K}$. (в) Центральный фрагмент спектров ЭПР в деформированном кристалле для разных углов между магнитным полем и направлением $[110]$: 0° до деформации (а), 0° после деформации (б), 90° после деформации (в). Сплошными линиями показаны аппроксимации спектра гауссовыми (сплошная линия) и лоренцевыми (пунктир) составляющими.

$S > 1/2$, отвечающими остальной периферийной структуре спектра ЭПР. Аппроксимация спектров, относящихся к переходам $\Delta m = 2$, гауссовыми и лоренцевыми линиями показана на рис. 4, в. Разложение на гауссовы

линии приводит к более аккуратной аппроксимации, что свидетельствует о неоднородном уширении линий ЭПР и находится в хорошем согласии с выводами о том, что степенной закон релаксации ядерной спиновой системы может быть обусловлен неоднородно распределенными деформационными дефектами.

Хотя концентрация дислокаций в деформированных кристаллах n_d была установлена методом химического травления, было необходимо учитывать, что дислокации — не единственный тип парамагнитных дефектов, которые вводятся при деформировании. Двойное интегрирование спектра ЭПР позволяло оценить спиновую восприимчивость, пропорциональную количеству парамагнитных центров с точностью до спинового фактора $S(S+1)$, который рассчитывался для значения $S = 1/2$. Сравнение магнитной восприимчивости деформационных дефектов с эталонным образцом $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (0.1 mg) дает концентрацию $\sim 10^{15}\text{ cm}^{-3}$ дефектов. Эта оценка на два порядка величины превышает оценку сверху для возможного количества парамагнитных центров на дислокациях. Последнее было получено из типичной линейной концентрации оборванных связей $n^* \sim 10^7\text{ cm}^{-1}$ и среднего размера дислокационной петли $\lambda \sim 10^{-2}\text{ cm}$ [16–18]. В результате получилось $n\sigma \cdot b \cdot \lambda \cdot n^* \cdot n_d = 10^{13}\text{ cm}^{-3}$ (а и b линейные размеры кристалла). Таким образом, пластическая деформация помимо дислокаций генерирует значительное количество парамагнитных центров, поскольку, как показано в [16–18] при высокотемпературной деформации кремния ($T > 650^\circ\text{C}$) в нем зарождаются многочисленные комплексы кислорода в плоскости скольжения дислокаций. Эти центры, наряду с дислокациями и акцепторами также могут давать вклад в ядерную релаксацию по степенному закону.

4. Выводы

Восстановление намагниченности в подсистеме ядерных спинов, насыщенной радиочастотными импульсами, подчиняется степенному закону при 300 K в исследованном интервале времен, в то время как при 500 K , наблюдается примесь экспоненциальной компоненты релаксации намагниченности. Степенной закон релаксации ядерных спинов соответствует прямому взаимодействию между спинами ядер и спинами деформационных дефектов. Примесь процесса, соответствующего экспоненциальной кинетике, отвечает релаксации ядерных спинов путем спиновой диффузии и взаимодействию ядерных спинов со спинами однородно распределенных акцепторов бора. Пластическая деформация кристаллов приводит также к появлению множественных линий ЭПР, отвечающих запрещенным переходам как в подзонах „легких“ и „тяжелых“ дырок, так и между этими подзонами. Кроме линий, отвечающих известным переходам между дырочными уровнями, появляются дополнительные линии неизвестной природы.

Список литературы

- [1] D.P. DiVincenzo. *Nature* **393**, 113 (1998).
- [2] A. Ardavan, G.A.D. Briggs. *Phil. Trans. R. Soc. A* **369**, 3229 (2011).
- [3] H.T. Hui. *Phys. Rev. B* **74**, 195 309 (2006).
- [4] F.A. Zwanenburger, A.S. Dzurak, A. Morello, M.Y. Simmons, L.C.L. Hollenberg, G. Klimeck, S. Rogge, S.N. Coppersmith, M.A. Eriksson. *Rev. Mod. Phys.* **85**, 961 (2013).
- [5] B.E. Kane. *Nature* **393**, 133 (1998).
- [6] S. Simmons, R.M. Brown, H. Riemann, N.V. Abrosimov, P. Becker, H. Pohl, M.L.W. Thewalt, K.M. Itoh, J.J.L. Morton. *Nature* **470**, 69 (2011).
- [7] T.D. Ladd, D. Maryenko, Y. Yamamoto, E. Abe, K.M. Itoh. *Phys. Rev. B* **71**, 014 401 (2005).
- [8] H. Hayashi, K.M. Itoh, L.S. Vlasenko. *Phys. Rev. B* **78**, 153 201 (2008).
- [9] H. Hayashi, T. Itahashi, K.M. Itoh, L.S. Vlasenko, M.P. Vlasenko. *Phys. Rev. B* **80**, 045 201 (2009).
- [10] S.E. Fuller, E.M. Meintjes, W.W. Warren. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2806 (1996).
- [11] R.K. Sundfors, D.F. Holcomb. *Phys. Rev.* **136**, A810 (1964).
- [12] H. Neubrand. *Phys. Status Solidi. B* **86**, 269 (1978).
- [13] L. Bartelsen. *Phys. Status Solidi. B* **81**, 471 (1977).
- [14] A.R. Stegner, H. Tezuka, T. Andlauer, M. Stutzmann, M.L.W. Thewalt, M.S. Brandt, K.M. Itoh. *Phys. Rev. B* **82**, 115 213 (2010).
- [15] H. Tezuka, A.R. Stegner, A.M. Tyryshkin, S. Shankar, M.L.W. Thewalt, S.A. Lyon, K.M. Itoh, M.S. Brandt. *Phys. Rev. B* **81**, 161 203(R) (2010).
- [16] N.T. Bagraev, A.I. Gusarov, V.A. Mashkov. *JETP* **92**, 968 (1987).
- [17] V.A. Grazhulis, Y.A. Ossipyan. *JETP* **60**, 1150 (1971).
- [18] E.R. Weber, H. Alexander. *J. Physique* **44**, C4-319 (1983).
- [19] N.T. Bagraev, L.S. Vlasenko. *JETP* **83**, 2186 (1982).
- [20] M. Edén. *Ann. Rep. Prog. Chem. Sect. C: Phys. Chem.* **108**, 177 (2012).
- [21] P.L. Guennec, M. Nechtschein, J.P. Travers. *Phys. Rev. B* **47**, 2893 (1993). S.
- [22] F. Devreux, J.P. Boilot, F. Chaput, B. Sapoval. *Phys. Rev. Lett.* **65**, 614 (1990).
- [23] W.E. Blumberg. *Phys. Rev.* **119**, 79 (1960).
- [24] Sen, J.F. Stebbins. *Phys. Rev. B* **50**, 822 (1994).