

Магнитомеханический эффект в приповерхностных слоях кремния Cz-Si

© О.В. Коплак¹, А.И. Дмитриев², Р.Б. Моргунов²

¹ УНЦ „Физико-химическое материаловедение“ Киевского национального университета им. Т. Шевченко и НАН Украины, Киев, Украина

² Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Московская обл., Россия

E-mail: aid@icp.ac.ru

(Поступила в Редакцию 27 декабря 2011 г.)

Обнаружено изменение механических свойств приповерхностных слоев кристаллов кремния, выращенных методом Чохральского Cz-n-Si(111), под действием постоянного магнитного поля ($B \sim 0.1$ Т). Магнитостимулированное изменение микротвердости, модуля Юнга, коэффициента пластичности кристаллов кремния коррелирует с изменением параметра кристаллической решетки и внутренних напряжений. Главную роль в магнитомеханическом эффекте играет рост оксидной пленки под действием магнитного поля за счет уменьшения концентрации кислородных комплексов в приповерхностных слоях образца. В микроструктурированном кремнии, где поверхность значительно более развита, магнитное поле вызывает более глубокие изменения внутренних напряжений, чем в монокристаллах.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 10-03-00314-а).

1. Введение

Одним из необычных явлений в кремнии и других полупроводниках является влияние магнитного поля (МП) на перестройку подсистемы структурных дефектов и ряд физических свойств [1–5]. Главную роль в этих эффектах играют комплексы точечных дефектов в кристаллах и их способность к магнитостимулированной трансформации. Возможные физические механизмы, лежащие в основе этого явления, описаны в [6,7] на примере аналогичных явлений в ионных кристаллах. Изменение физических свойств кристаллов кремния под действием МП вызвано преобразованием неравновесных комплексов точечных дефектов под действием МП. Роль МП сводится к облегчению их необратимого перехода в равновесное состояние. В кристаллах кремния в отсутствие какой-либо специальной предварительной обработки, создающей неравновесные дефекты в кристалле (закалка, облучение и т. п.), неравновесными областями являются:

— поверхность кремния, покрытая естественным оксидом SiO₂ [8], содержащая оборванные химические связи, аморфный кремний и сложные примесные комплексы [9,10];

— интерфейс Si/SiO₂, промежуточный слой которого состоит из субоксидов Si¹⁺, Si²⁺ и Si³⁺ [11]. На интерфейсе могут существовать много неэквивалентных Si–O–Si-связей: пероксидная связь, конфигурация двойного моста, изолированные и немостиковые атомы O, которые не формируют связь с исходными атомами [12,13];

— упругонапряженный слой кремния под интерфейсом с параметром кристаллической решетки, измененным вследствие несоответствия граничащих фаз [12].

В результате упругих взаимодействий точечных дефектов с полями напряжений пограничный слой (интерфейс Si/SiO₂) и поверхность могут исполнять роль стока

диффузионно-подвижных дефектов, как из объема полупроводника, так и из его оксида. На межфазных границах кремниевых структур (Si/SiO₂), кроме точечных дефектов наблюдаются структурные макродефекты в виде кластеров — небольших скоплений атомов Si и молекул SiO₂, других адсорбируемых из атмосферы молекул с локальными концентрациями, которые значительно превышают среднее значение по всей поверхности [14]. Наличие таких дефектов и создаваемых ими напряжений (неравновесностей) является фактором, который стимулирует перестройку дефектной структуры полупроводника и дает возможность управления каналами релаксации и ее кинетикой с помощью МП. Изменение микромеханических характеристик (подвижность дислокаций, микротвердость и др.) является косвенным откликом на такие процессы. Спектроскопические методы исследования дефектов несут более надежную и однозначную информацию. Например, метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) является общепринятым для аттестации тонких приповерхностных слоев кремния и позволяет судить о толщине оксидного слоя, энергии связи кремний-кислородных комплексов. Поэтому целью работы было установление закономерностей влияния постоянного магнитного поля (~ 0.1 Т) на релаксационные процессы дефектно-примесных комплексов и соответствующие изменения структурно-зависимых свойств кристаллов Si, как по изменению механических характеристик, так и по соответствующему отклику в спектрах РФЭС и рентгеновской дифракции.

2. Методика

В экспериментах использовали промышленные монокристаллические пластины кремния, выращенные мето-

дом Чохральского Cz-*n*-Si(111), *n*-типа проводимости с легирующей примесью фосфором (4.5 Ohm · cm). На поверхности кристаллов была естественная пленка оксида толщиной ~ 1 nm. Кроме того, для проверки роли поверхности в исследуемых эффектах использовали микроструктурированный кремний с размером частиц 10–20 μm.

Магнитная обработка (МО) представляла собой выдержку образцов кремния в постоянном МП с индукцией $B = 0.17$ Т. Длительность МО варьировалась в пределах 4–60 дней, что, как показано в [6,7], необходимо для накопления достаточного (макроскопического) количества комплексов, преобразованных в магнитном поле.

Для установления энергии связи электронов на поверхности и в объеме кристалла использовали метод РФЭС. Эффективная глубина выхода фотоэлектронов составляла 2–5 nm при энергии рентгеновских квантов $E = 1–2$ keV. Точность определения энергии связи электронов составляла 0.1 eV. В работе использовали электронный спектрометр ЕС-2402 с энергоанализатором RHOIBOS-100-SPECS ($E_{MgK\alpha} = 1253.6$ eV, $P = 200$ W). Спектрометр оснащен ионной пушкой IQE-11/35 и пушкой медленных электронов FG-15/40 для компенсации зарядки поверхности образцов. Спектры Si2*p*-уровня были разложены на отдельные компоненты с шириной на половине высоты 1.2 eV(Si)/1.5 eV(SiO₂). Разложение проводилось после вычитания фона по методу Ширли [15].

Для обнаружения изменений, вызванных МП в структуре и структурно-чувствительных характеристиках кристаллов, было привлечено несколько типов рентгеновских дифракционных методов. Рентгеноструктурные исследования монокристаллического Cz-*n*-Si(111) проводили на дифрактометре ДРОН-3 ($U = 26$ kV, $J = 14$ mA), температура при съемке $T = 23^\circ\text{C}$. Фокусировку проводили по методу Брэгга–Брентано. Аппаратная погрешность измерения углов дифракции не превышала 0.003° . Относительную деформацию $\varepsilon = \Delta d/d$ (здесь d — параметр решетки) рассчитывали по формуле:

$$\Delta d/d = n/(4 \cdot \text{tg}(\theta)), \quad (1)$$

где n — полуширина дифракционного максимума, θ — угол дифракции.

Рентгенографические исследования микроструктурированного кремния проводили на автоматическом дифрактометре STOE STADI P („STOE & Cie GMBH“) с линейным позиционно-чувствительным детектором PSD и схемой модифицированной геометрии Гинье. Метод на прохождение ($\text{CuK}\alpha_1$ — излучение; согнутый Ge-монокроматор [111] типа Иоганна; $2\theta/\omega$ -сканирование, интервал углов $25.000^\circ \leq 2\theta \leq 128.185^\circ$ с шагом 0.015° ; шаг детектора 0.480° , время сканирования в шаге 22 s, температура при съемке $T = 23.05^\circ\text{C} \pm 0.01^\circ\text{C}$, $U = 40$ кV, $J = 40$ mA).

Первичную обработку экспериментальных дифракционных массивов, расчет теоретических дифрактограмм,

индексирование параметров элементарных ячеек проводили с помощью пакета программ STOE WINXPOW [16] и PowderCell [17]. По данным экспериментальных массивов и структурных моделей проводился расчет теоретических интенсивностей и уточнение параметров элементарной ячейки по методу Ритвельда с использованием программы FullProf.2k [18]. Расчет микроструктурных параметров (внутренние напряжения) в изотропном приближении проведен методами интегральной ширины дифракционных пиков с помощью алгоритмов программ WINPLOTR [19].

С помощью метода наноиндентирования возможно определять не только микротвердость, но и такие важные механические характеристики, как модуль Юнга, коэффициент пластичности, распределение внутренних напряжений и т.п. Кроме того, этот метод незаменим для исследования тонких приповерхностных слоев, где происходят начальные стадии внедрения индентора и пластической деформации. Поэтому исследование механических свойств в наших опытах проводили на установке „Микрон-гамма“, в котором глубина погружения алмазной пирамидки Берковича составляла $h \sim 2.5$ nm при комнатной температуре (нагрузка P регулировалась в пределах 0–100 cN). Индентирование сопровождалось автоматической записью диаграмм нагрузки/разгрузки в координатах $P-h$. Данный метод обеспечивал относительную погрешность определения микротвердости на уровне ~ 0.05%.

3. Экспериментальные результаты

На рис. 1. приведены рентгеновские фотоэлектронные спектры для уровня Si2*p*, которые демонстрируют изменения в системе Si/SiO₂ вследствие влияния магнитного поля. SiO₂-природная пленка оксида, вклад которой определяли как сразу после выдержки образцов в МП, так и через 12 суток после завершения МО. Толщина естественного слоя оксида d_{ox} была рассчитана по данным измерений интегральной интенсивности пиков кремния I_{Si} и оксида I_{Ox} по формуле [20]

$$d_{\text{ox}} = \lambda_{\text{Ox}} \cos(\theta_t) \ln \left[\frac{I_{\text{Ox}} \rho_{\text{Si}} \lambda_{\text{Si}}}{I_{\text{Si}} \rho_{\text{Ox}} d_{\text{Ox}}} + 1 \right],$$

где, θ_t — угол падения рентгеновского луча относительно нормали к поверхности образца; λ_{Si} и λ_{Ox} — длины свободного пробега фотоэлектронов в кремнии и оксиде кремния, соответственно; ρ_{Si} и ρ_{Ox} — плотности кремния и оксида кремния соответственно. Для расчета взяты типичные значения: $\lambda_{\text{SiO}_2} = 3.3$ nm; $\lambda_{\text{Si}} = 2.8$ nm; $\rho_{\text{Ox}} = 2.2 \cdot 10^{22}$ cm⁻³ (аморфный оксид), $\rho_{\text{Si}} = 5.0 \cdot 10^{22}$ cm⁻³; $I_{\text{Ox}}/I_{\text{Si}} = 0.160$ (исходный); $I_{\text{Ox}}/I_{\text{Si}} = 0.970$ (после МП) и $I_{\text{Ox}}/I_{\text{Si}} = 0.22$. Толщина оксидной пленки в контрольных образцах d_{ox} , которые не проходили МО, составляла 0.9 nm. После МО в течение 10 дней толщина пленки SiO₂ увеличилась в ~ 4 раза (до $d_{\text{ox}} = 3.5$ nm). Через 12 суток после

извлечения образцов из магнитного поля наблюдалось частичное восстановление толщины оксидной пленки к значению $d_{\text{ox}} = 1.2 \text{ nm}$. Сходные вариации d_{ox} были получены при измерении толщины оксидной пленки методом лазерной эллипсометрии.

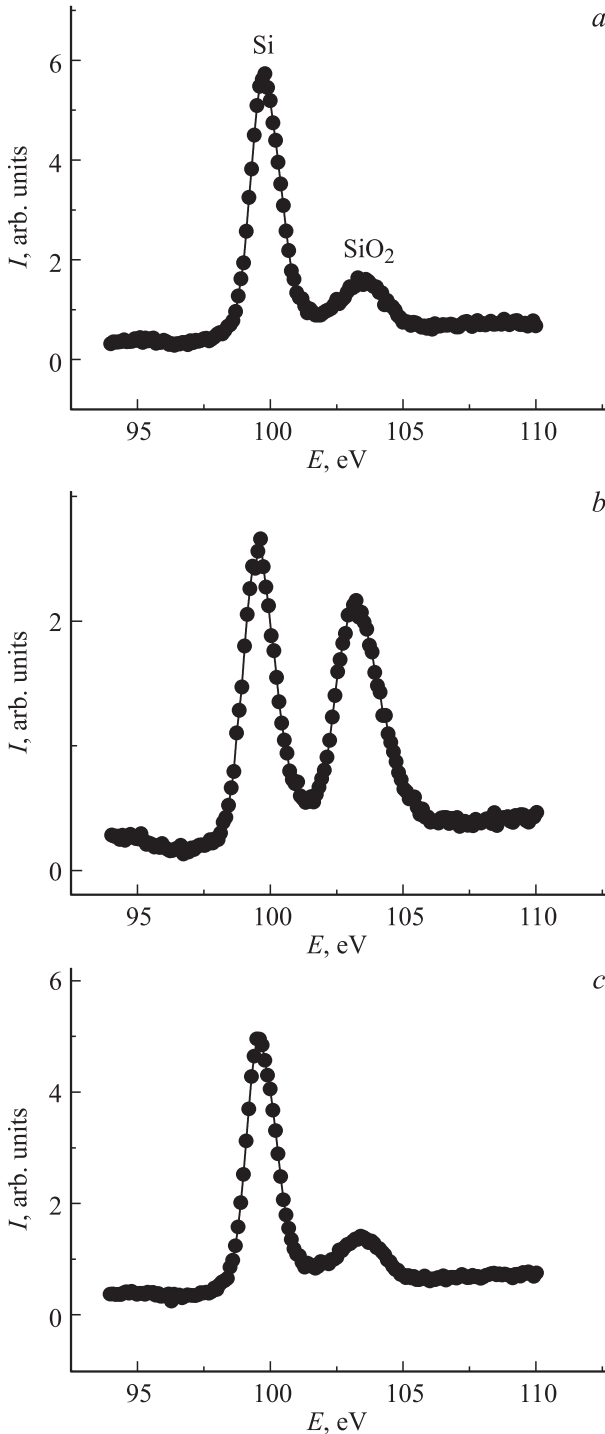


Рис. 1. Спектры рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии для образцов Cz-n-Si(111): (a) исходные (контрольные) образцы, (b) сразу после выдержки в магнитном поле в течение 10 суток, (c) после магнитной обработки и выдержки образцов на воздухе в течение 12 суток.

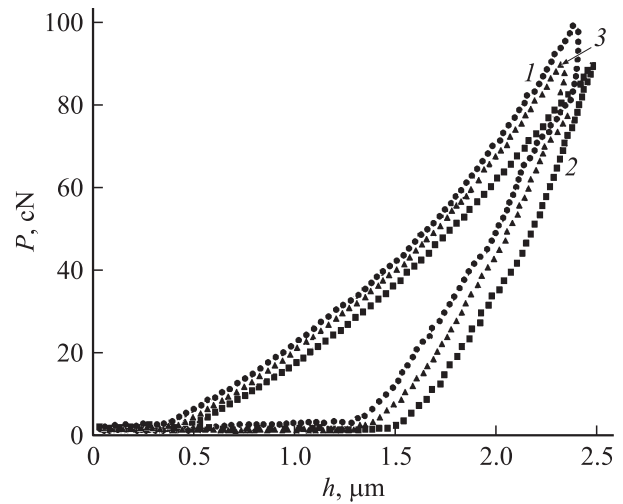


Рис. 2. Диаграммы „нагрузка на индентор P — глубина погружения h “: 1 — до магнитной обработки, 2 — сразу после завершения магнитной обработки в магнитном поле в течение 7 суток, 3 — через 12 часов выдержки на воздухе после завершения магнитной обработки в магнитном поле.

Изменение толщины слоя естественного оксида на поверхности кремния вследствие выдержки образца в МП отражается на микронапряженном состоянии и концентрации кислорода в приповерхностной области толщиной до $\sim 1 \mu\text{m}$ и поэтому может влиять на микротвердость кристалла. Поэтому в следующей серии экспериментов были получены диаграммы внедрения алмазного индентора в координатах „нагрузка P — глубина погружения h “ до и после МО (рис. 2). Из диаграмм $P-h$ были определены динамическая невосстановленная микротвердость H_{dyn} и восстановленная микротвердость H_C по формулам [21]

$$H_{\text{dyn}} = 0.408 \frac{P}{h_{\text{max}}^2}, \quad H_C = 0.408 \frac{P}{h_C^2},$$

где h_{max} — глубина погружения индентора при максимальной нагрузке; h_C — глубина восстановленного отпечатка после разгрузки; 0.408 — численный коэффициент, который учитывает форму индентора Берковича. Известно, что микротвердость, которая измеряется по глубине вдавливания индентора под нагрузкой („невосстановленная микротвердость“), не равна микротвердости, которую измеряют по восстановленному (разгруженному) отпечатку („восстановленная микротвердость“). Отношение H_{dyn}/H_C зависит от режима деформирования и свойств материала.

Модуль упругости E и коэффициент пластичности K рассчитывали на основе экспериментальных данных по формулам: $E = 1.78 \frac{AP}{h_C}$, $K = (W_{\text{tot}} - W_{\text{flex}})/W_{\text{tot}}$, где W_{tot} — работа, которая выполнена при погружении индентора на максимальную глубину; W_{flex} — энергия упругой деформации, высвобождаемая при разгрузке индентора [22].

Сравнение диаграмм $P-h$ до и после МО (рис. 2) показывает, что под действием МП:

- уменьшается угол наклона кривых нагрузки на конечных стадиях внедрения индентора, т.е. наблюдается его облегченное погружение,
- увеличивается глубина остаточного отпечатка от 1.3 до 1.5 μm ,
- уменьшаются модуль Юнга (на 4%) (рис. 3),
- восстановленная микротвердость уменьшается на $\sim 5 + 0.1\%$, невосстановленная — на $\sim 6 + 0.1\%$ (рис. 4).

Все эти изменения указывают на увеличение пластичности Cz-Si и изменение упругонапряженного состояния приповерхностных слоев Si, после МО. Из рис. 3 видно, что жесткость кристаллов кремния H_C/E сразу после магнитной обработки существенно уменьшается, но через определенное время (~ 24 h) имеет место восстановление этого параметра. Наблюдается также

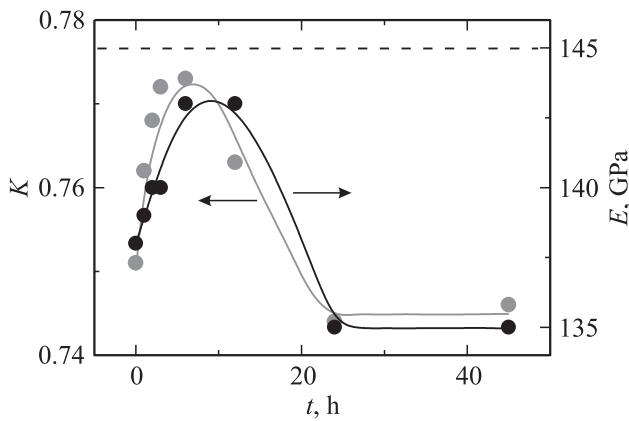


Рис. 3. Зависимость коэффициента пластичности K и модуля Юнга E , образцов кремния от времени после обработки в магнитном поле в течение 7 суток. Пунктирной линией показано значение модуля Юнга E для исходных (контрольных) образцов кремния.

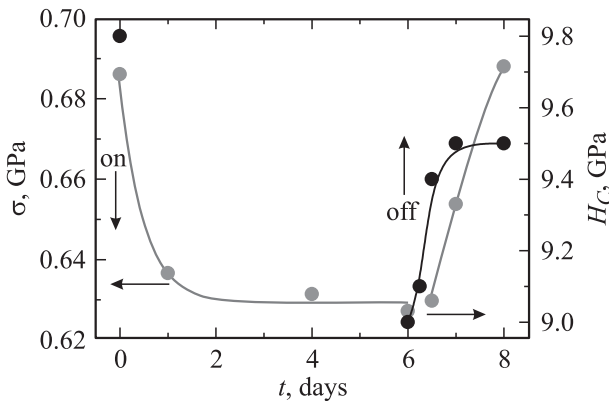


Рис. 4. Зависимости внутренних микронапряжений σ (светлые символы) и микротвердости H_C (темные символы) от текущего времени для образцов Cz-n-Si(111). Стрелками показаны моменты включения и выключения магнитного поля.

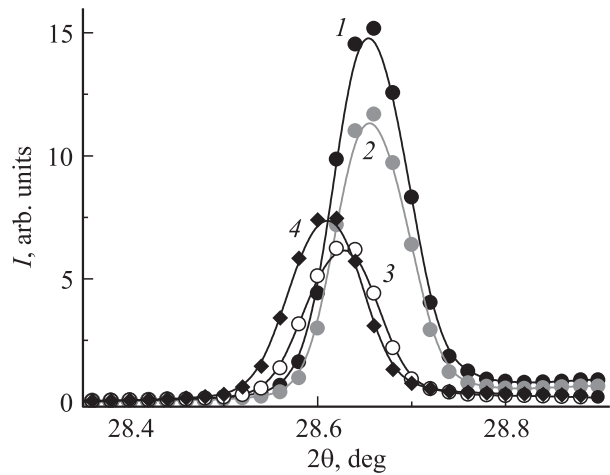


Рис. 5. Фрагмент рентгеновской дифрактограммы для рефлекса (111): 1 — до магнитной обработки; 2, 3, 4 — после магнитной обработки в магнитном поле в течение 1, 4, 8 суток соответственно.

восстановление микротвердости и коэффициента пластичности.

Исходные значения механических характеристик Si (до МП) совпадают с величинами, приведенными в литературе: $H_C = 9.8$ GPa, жесткость $H_C/E = 0.89$, $E = 145$ GPa [23].

Если наблюдаемые изменения механических свойств кристаллов под действием МП связаны с релаксацией внутренних напряжений, то это должно отражаться на структурных характеристиках материала, таких как величина микронапряжений и параметр решетки. На рис. 5 в качестве иллюстрации приведены типичные кривые дифракционного отражения Cz-n-Si(111). Магнитное поле вызывает сдвиг дифракционных максимумов в область меньших углов, при этом изменяется их полуширина и интенсивность (рис. 5). Как известно, величина микронапряжений прямо пропорциональна величине относительной деформации: $\sigma = E\epsilon$ (здесь σ — внутренние микронапряжения, E — модуль Юнга).

На рис. 4 приведены зависимости изменения внутренних микронапряжений в кристаллах Cz-n-Si(111) от времени. В результате выдержки образцов в МП величина внутренних микронапряжений уменьшается, а параметр решетки увеличивается. Таким образом, расчеты величины относительной деформации указывают на смену упругонапряженного состояния кристаллов кремния после влияния МП. Как видно из рис. 4 после выключения МП внутренние микронапряжения частично восстанавливаются, что коррелирует с изменением величины микротвердости. Это свидетельствует о протекании конкурирующего процесса, противоположного релаксации внутренних напряжений, который может быть связан с миграцией кислорода в приповерхностных слоях.

Для подтверждения роли приповерхностных слоев и процессов, связанных с наличием кислорода, были

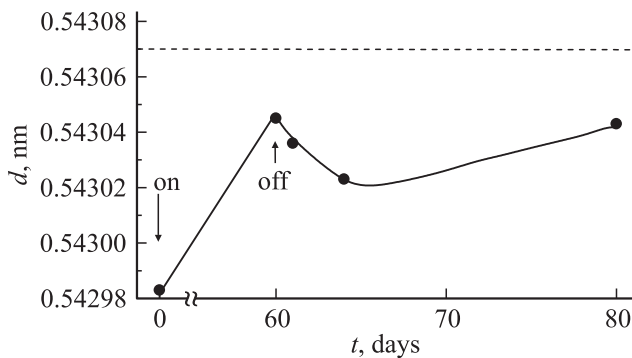


Рис. 6. Зависимости параметра решетки микроструктурированного кремния от текущего времени. Стрелками показаны моменты включения и выключения магнитного поля. Пунктирной линией показано значение параметра решетки кремния в недеформированном неискаженном состоянии.

проведены рентгеновские дифракционные исследования на микроструктурированном кремнии с развитой поверхностью. Размер кристаллитов составлял 10–40 мкм. Измельчение монокристаллического кремния должно было приводить не только к увеличению площади поверхности, но и к значительному увеличению концентрации оборванных связей. Поэтому процессы окисления на поверхности микроструктурированного кремния должны протекать интенсивнее по сравнению с массивным монокристаллическим кремнием. В наших опытах наблюдалось увеличение параметра решетки в процессе выдержки образцов в МП и его частичное восстановление после завершения магнитной обработки (рис. 6).

4. Обсуждение

Из анализа спектров РФЭС (рис. 1) следует, что магнитное поле приводит к росту оксидной пленки на начальном этапе, а затем толщина оксидного слоя восстанавливается к исходному значению. Обычно рост диоксида кремния на поверхности кремния наблюдают при повышенных температурах (450–1200 °С) [8–13, 24, 25]. В настоящей работе представлены данные об ускорении роста оксидной пленки в МП при комнатной температуре.

Рассмотрим сначала эффект роста фазы SiO₂ после выдержки образцов в МП, который подтверждается в нашей работе так же и методом рентгеновской дифракции. Так как межфазная граница содержит оборванные кремниевые связи, межузельные атомы, вакансии, недоокисленные атомы кремния, комплексы точечных дефектов и другие неравновесные дефекты, в этой области протекают многообразные химические реакции между атомами Si и O. Фронт химической реакции распространяется к поверхности (туда, где есть поставщик молекулярного кислорода), и в глубь образца (где есть поставщик межузельных атомов кремния). Миграция межузельных атомов кремния, кислорода, вакансий к

поверхности, как к энергетически выгодному стоку дефектов происходит под действием внутренних микронапряжений на границе Si/SiO₂. Конечным результатом магнитостимулированной химической реакции является образование энергетически выгодных комплексов кислородсодержащих дефектов. Кроме того, процесс химической перестройки комплексов в МП сопровождается релаксацией упругонапряженного состояния кристаллической решетки. Об этом свидетельствует рост параметра решетки после МО от исходного уменьшенного значения 0.54298 нм до величины 0.54305 нм, близкой к справочному значению 0.543102 нм для равновесной нескатой решетки кремния [23] (рис. 6). Таким образом, диффузионно-контролируемая миграция Si, O₂, вакансий и образование комплексов точечных дефектов в МП приводит к уменьшению приповерхностных зон сжатия и релаксации внутренних напряжений, т.е. эти процессы являются энергетически выгодными и дают высвобождение свободной энергии на единицу объема $\sim E\varepsilon^2/2 = 2 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$.

Базируясь на существующих в литературе взглядах [1–7, 26], можно допустить, что МП стимулирует разрыв химических связей Si–O в неравновесных кислородсодержащих комплексах, среди которых доминируют SiO_x преципитаты. Это приводит к высвобождению атомарного кислорода, который затем включается в состав более стабильных равновесных комплексов и оксидной пленки. Этот процесс можно представить как обеднение приповерхностных слоев атомами кислорода, что в свою очередь создает перепад химического потенциала между поверхностью и объемом образца. В результате после выключения магнитного поля молекулярный кислород из окружающей атмосферы диффундирует через оксидную пленку к границе раздела Si/SiO₂ (согласно модели Дилла–Груве [28]), а атомарный кислород мигрирует к границе раздела Si/SiO₂ из объема кристалла. Таким образом, внутренние микронапряжения частично снова восстанавливаются за счет минимизации градиента химического потенциала. В предположении двукратного перепада концентрации в обедненном слое $C_1/C_2 = 2$ и общей концентрации кислорода в нем на уровне $C = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, соответствующий вклад химического потенциала в свободную энергию равен $\sim CkT \ln(C_1/C_2) = 3 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$. Вклады упругой деформации приповерхностного слоя и химического потенциала по энергии близки и могут конкурировать друг с другом, приводя к восстановлению упругих напряжений. Это приводит к восстановлению и других характеристик (микротвердости, параметра решетки, толщины оксидной пленки). При этом кремний-кислородные комплексы, образовавшиеся в магнитном поле, уже не изменяются, будучи энергетически выгодными. Об этом свидетельствует контрольный опыт, в котором выдержка в поле осуществлялась в течение времени, значительно превышающего диффузионные времена, необходимые для восстановления концентраций кислорода в приповерхностном слое после его магнитостимулированного обеднения (100–200 суток) [28]. В этих опытах после

отключения магнитного поля не наблюдалось восстановления микротвердости, а повторные приложения МП к таким кристаллам не вызвали каких-либо изменений. Таким образом, МП в наших экспериментах инициирует образование энергетически выгодных стабильных комплексов из неравновесных комплексов. Кажущееся восстановление свойств кристаллов после отключения МП вызвано не возвращением комплексов в исходное состояние, а конкуренцией процессов релаксации напряжений и химического потенциала.

Касаясь вопроса о том, каким образом МП стимулирует химические реакции в комплексах, упомянем работы [6,7], в которых было показано, что спиновая конверсия в примесных комплексах в моменты их термической активации в „разделенное“ состояние приводит к перестройке их электронной структуры и к распаду, за которым следует образование более стабильных дефектов. Применительно к кремнию, в [26] методом *ab initio* молекулярной динамики был исследован процесс окисления поверхности кремния. Было показано, что он протекает через стадию внедрения кислорода в Si–Si связь. При этом эффективность окисления на промежуточной стадии зависит от мультиплетности кислорода [26,29]. Исходная молекула-предшественница O₂ пребывает в самом низком по энергии триплетном (T) состоянии. Однако внедрение кислорода в Si–Si связь требует перехода молекулы в синглетное состояние (S). Спиновая конверсия происходит с выигрышем по энергии 0.1–1 eV. Численное моделирование в [26] позволило получить возможные атомные конфигурации как для метастабильных комплексов предшественников, так и для равновесных стабильных продуктов спин-зависимой реакции. В МП происходит прецессия в паре спинов, один из которых, например, отвечает оборванной кремниевой связи, а другой — молекуле немостикового кислорода. Прецессия спинов различных частиц происходит с немного разной частотой, что приводит к периодическому переходу между S- и T-состояниями. Образование Si–O–Si-фрагмента возможно только из синглетного состояния, которое в отсутствие магнитного поля не возникает. Поэтому реакция оказывается запертой потенциальным барьером, обусловленным силами электростатической природы (запретом Паули). В магнитном поле этот запрет снимается, ускоряя окисление кремния.

5. Выводы

1. С помощью метода РФЭС обнаружено, что после магнитной обработки толщина пленки оксида кремния растет в 4 раза, что указывает на инициированное магнитным полем интенсивное окисление поверхности Cz–n–Si(111), которое приводит к изменению количества оксидной фазы SiO₂.

2. Через 12 суток после завершения магнитной обработки толщина пленки возвращается к значениям, близким к исходным, как и целый ряд механических

параметров (жесткость, микротвердость, внутренние напряжения, параметр решетки и др.). Это объясняется конкуренцией релаксации внутренних напряжений и градиента химического потенциала, возникшего в результате обеднения интерфейса атомами кислорода в процессе магнитостимулированной химической реакции.

3. Магнитное поле необратимо преобразует метастабильные кремний-кислородные комплексы, содержащиеся в кристалле до его приложения в более стабильные, энергетически выгодные дефекты.

Авторы благодарны А.Л. Бучаченко, Л.П. Стебленко за обсуждения, М.А. Васильеву, С.И. Мудрому за помощь в проведении экспериментов.

Список литературы

- [1] V.I. Alshits, E.V. Darinskaya, M.V. Koldaeva, E.A. Petrzhik. In: Dislocations in solids / Ed. J.P. Hirth. Elsevier, Amsterdam (2008). V. 14. Ch. 86. P. 333.
- [2] M. Badyevich, Yu. Iunin, V. Kveder, V. Orlov, Yu. Ossipyan. Solid State Phenomena **95–96**, 433 (2004).
- [3] O. Koplak, A. Dmitriev, T. Kakeshita, R. Morgunov. J. Appl. Phys. **110**, 044905 (2011).
- [4] I. Yonenaga, K. Takahashi. J. Appl. Phys. **101**, 053528 (2007).
- [5] А.А. Скворцов, А.В. Каризин. ЖЭТФ **140**, 1 (2011).
- [6] Р.Б. Моргунов, А.Л. Бучаченко. ЖЭТФ **136**, 505 (2009).
- [7] R.B. Morgunov, A.L. Buchachenko. Phys. Rev. B **82**, 014115 (2010).
- [8] L.C. Ciacchi, M.C. Payne. PRL **95**, 196101 (2005).
- [9] K. Kato, T. Uda. Phys. Rev. B **62**, 15978 (2000).
- [10] Y. Miyamoto, A. Oshiyama. Phys. Rev. B **41**, 12680 (1990).
- [11] J. Lambers, P. Hessa. J. Appl. Phys. **94**, 2937 (2003).
- [12] J.R. Engstrom, D.J. Bonser, T. Engel. Surf. Sci. **268**, 238 (1992).
- [13] T. Akiyama, H. Kageshima. Appl. Surf. Sci. **216**, 270 (2003).
- [14] О. Коплак. Спин-зависимые реакции на поверхности кремния. LAP Lambert Academic Publishing, Saarbrücken (2011). 176 с.
- [15] D.A. Shirley. Phys. Rev. B **5**, 4709 (1972).
- [16] Stoe WinXPow, version 2.21, Stoe & Cie GmbH, Darmstadt http://www.stoe.com/pages/brochure/winxpow_brochure.pdf
- [17] W. Kraus, G. Nolze. J. Appl. Cryst. **29**, 301 (1996).
- [18] J. Rodriguez-Carvajal. Newsletter **26**, 12 (2001).
- [19] T. Roisne, J. Rodriguez-Carvajal. Mater. Sci. Forum **378–381**, 118 (2001).
- [20] M.P. Seah. Surf. Interface Anal. **37**, 300 (2005).
- [21] W.C. Oliver, G.M. Pharr. J. Mater. Res. **7**, 1564 (1992).
- [22] W.C. Oliver, G.M. Pharr. J. Mater. Res. **19**, 3 (2004).
- [23] W.C. O'Mara, R.B. Herring, L.P. Hunt. Handbook of semiconductor silicon technology. Noyes Publications, N.J. (1990). 780 p.
- [24] M. Suezawa, Y. Yamamoto, M. Suemitsu, N. Usami, I. Yonenaga. Appl. Phys. Lett. **93**, 101904 (2008).
- [25] M. Suezawa, Y. Yamamoto, M. Suemitsu, I. Yonenaga. Physica B **404**, 5156 (2009).
- [26] A. Bongiorno, A. Pasquarello. Phys. Rev. Lett. **93**, 086102 (2004).
- [27] B.E. Deal, A.S. Grove. J. Appl. Phys. **36**, 3770 (1965).
- [28] В. Макара, М. Васильев, Л. Стебленко, О. Коплак, А. Курлюк, Ю. Кобзарь, С. Науменко. ФТП **42**, 1061 (2008).
- [29] W. Orellana, A.J.R. da Silva, A. Fazzio. Phys. Rev. Lett. **87**, 155901 (2001).