

Атомная и электронная структура собственных дефектов в Ta₂O₅: *ab initio* моделирование

Т. В. Перевалов^{+*1)}, Д. Р. Исламов^{+*}, И. Г. Черных[×]

⁺Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

^{*}Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

[×]Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 3 мая 2018 г.

Изучается атомная и электронная структура собственных точечных дефектов в орторомбическом оксиде тантала методами численного моделирования в рамках теории функционала плотности. Показано, что все дефекты, приводящие к обогащению Ta₂O₅ металлом, выступают в качестве электронных и дырочных ловушек. В условиях сильного обеднения кислородом и на контакте металл–диэлектрик, характерных для элементов резистивной памяти, междоузельные атомы тантала играют конкурентную с вакансией кислорода роль в формировании проводящего филамента. Междоузельные атомы кислорода не участвуют в транспорте заряда. Тантал, замещающий кислород, можно рассматривать как комбинацию кислородной вакансии и междоузельного тантала. Анализ рассчитанных значений термической и оптической энергии ионизации ловушек показывает, что именно вакансия кислорода является ключевым дефектом для переноса заряда в Ta₂O₅.

DOI: 10.7868/S0370274X18120056

Оксид тантала является одним из наиболее перспективных материалов для использования в качестве запоминающей среды элементов энергонезависимой памяти, основанной на обратимом переходе диэлектрической пленки из высокоомного состояния в низкоомное при протекании импульса тока (резистивная память – “*Resistive Random Access memory*” (RRAM)) [1–5]. RRAM элементы на основе оксида тантала демонстрируют высокое быстродействие в режиме перепрограммирования (~ 1 нс) [1], длительное время хранения информации [2], большое количество циклов записи/стирания ($\sim 10^{12}$) [3], низкое энергопотребление (< 6 фДж/цикл) [4] и обладают многоуровневым переключением [5]. Несмотря на выдающиеся достижения, потенциал RRAM на основе оксида тантала не раскрыт в достаточной мере для массового производства. Ключевыми проблемами на пути разработки RRAM являются контроль над процессом формовки (первого переключения из высокоомного состояния в низкоомное), воспроизводимостью характеристик переключения, а также их деградацией. Для решения указанных проблем необходимо понимание на атомном уровне физики резистивного переключения.

Современное объяснение резистивного эффекта опирается на филаментарную модель, заключающуюся в структурной перестройке локальной области диэлектрика под воздействием импульса тока за счет разрыва/восстановления связей металл–кислород и формирования высокой концентрации собственных дефектов, которые образуют проводящий канал (филамент) [6]. Поскольку резистивный эффект наблюдается в обогащенных металлом пленках, дефектами, формирующими филамент, являются вакансии кислорода, междоузельные атомы металла и атомы металла, замещающие кислород. Можно ожидать, что междоузельный кислород также является возможным дефектом, участвующим в формировании филамента. Строго говоря, перечисленные дефекты определены для кристаллических структур. Однако их можно определить и для аморфного оксида как локальное нарушение ближнего порядка. Отметим, что локально кристаллические области в аморфной пленке оксида тантала действительно появляются в области филамента за счет джоулева нагрева [7]. Чтобы выяснить способность собственных дефектов участвовать в транспорте заряда и формировании проводящего филамента в Ta₂O₅, необходимо установить их атомную и электронную структуру.

В настоящее время надежным методом изучения электронной структуры дефектов в твердых те-

¹⁾e-mail: timson@isp.nsc.ru

лах является квантово-химическое моделирование с использованием теории функционала плотности (ТФП). Существующие теоретические исследования Ta₂O₅ ограничиваются изучением главным образом вакансий кислорода в кристаллической [8–15] и аморфной [15–19] фазах как дефекта, ответственного за проводимость оксида [20, 21]. Недавние *ab initio* исследования Ta₂O₅ показали, что в аморфном Ta₂O₅ вакансии кислорода преимущественно нейтральные, и находятся в равновесии только в таком зарядовом состоянии в высокой концентрации [18]. Междоузельный кислород моделировался в [19, 22], однако определялась лишь энергия формирования дефекта и барьеры для его миграции. Электронная структура междоузельного тантала с акцентом на диффузионные характеристики рассчитывалась только в [14].

Таким образом, для Ta₂O₅ задача комплексно и методологически единообразного теоретического изучения атомной и электронной структуры вакансий кислорода, междоузельных атомов тантала и кислорода, атомов тантала, замещающих кислород, представляется актуальной. Целью настоящей работы является установление с позиции первопринципного моделирования способности перечисленных нейтральных дефектов в Ta₂O₅ захватывать электроны и дырки, и таким образом участвовать в процессах транспорта, а также определение, в какой степени они участвуют в формировании филамента.

Моделирование осуществляется для орторомбической фазы λ-Ta₂O₅ (*Pbam*) [23]. Это наиболее стабильная кристаллическая фаза Ta₂O₅, для которой локальное окружение атомов Ta и O, а также электронная структура (включая значение ширины запрещенной зоны E_g) хорошо согласуется с данными для аморфного Ta₂O₅. λ-Ta₂O₅ использовался в расчетах [12–15]. Показано, что электронная структура вакансий O в λ- и аморфном Ta₂O₅ качественно совпадают [15]. λ-Ta₂O₅ описывается 14-атомной примитивной ячейкой и формируется из слоев Ta₂O₃, содержащих двух- и трехкоординированные атомы O, и слоев чисто двухкоординированного O (далее называемый “кислородный слой”).

Расчеты проводятся в пакете *Quantum ESPRESSO* [24] в рамках ТФП с гибридным обменно-корреляционным функционалом V3LYP, воспроизводящем значение $E_g = 4.2$ эВ аморфного Ta₂O₅ [25]. Энергия отсечки разложения волновых функций валентных электронов Ta $6s^2 5d^3$ и O $2s^2 2p^4$ по базису из плоских волн составляет 950 эВ. Остов описывается псевдопотенциалами. Дефекты моделируются в 168-атомной суперячейке,

полученной $2 \times 2 \times 3$ -трансляцией примитивной ячейки. Энергии формирования E_{form} нейтральных вакансий и междоузельного кислорода (O_{vac} и O_{int}), а также междоузельного и замещающего кислород тантала (Ta_{int} и Ta_{subst}) рассчитываются согласно уравнениям:

$$E_{\text{form}}(O_{\text{vac}}) = E_d(O_{\text{vac}}) - E_p + \mu(O), \quad (1)$$

$$E_{\text{form}}(O_{\text{int}}) = E_d(O_{\text{int}}) - E_p - \mu(O), \quad (2)$$

$$E_{\text{form}}(Ta_{\text{int}}) = E_d(Ta_{\text{int}}) - E_p - \mu(Ta), \quad (3)$$

$$E_{\text{form}}(Ta_{\text{subst}}) = E_d(Ta_{\text{subst}}) - E_p + \mu(O) - \mu(Ta), \quad (4)$$

$$\mu(O)_{\text{min}} = \frac{1}{5}E(Ta_2O_5) - \frac{2}{5}E(Ta), \quad (5)$$

$$\mu(O)_{\text{max}} = \frac{1}{2}E(O_2), \quad (6)$$

$$\mu(Ta) = \frac{1}{2}E(Ta_2O_5) - \frac{5}{2}\mu(O). \quad (7)$$

Здесь E_p и E_d – энергии идеальной и дефектной суперячейки; $\mu(O)$ и $\mu(Ta)$ – химические потенциалы атомов O и Ta; $E(Ta_2O_5)$ – энергия структурной единицы, формирующей кристалл; $E(O_2)$ – энергия молекулы O₂ в триплетном (основном) состоянии; $E(Ta)$ – энергия атома Ta в металле. $\mu(O)_{\text{max}}$ – максимальное значение $\mu(O)$, когда атомы O, покидающие узлы решетки, формируют молекулу O₂ в атмосфере (кислород-обогащенный предел, O-rich limit). $\mu(O)_{\text{min}}$ – минимальное значение $\mu(O)$, возможное в контакте Ta₂O₅/Ta, когда атом O, покидающий узел решетки Ta₂O₅, окисляет металл (кислород-обедненный предел, O-poor limit). O-rich условия соответствуют дефектообразованию в стехиометрических пленках в процессе синтеза, O-poor – в RRAM элементах на границе металл-диэлектрик.

Выигрыш в энергии при захвате электрона со дна зоны проводимости $\Delta\varepsilon^e$ и дырки с потолка валентной зоны $\Delta\varepsilon^h$ на дефект оцениваются по методу, предложенному в [26]:

$$\Delta\varepsilon^{e/h} = (E_p^{q=-1/+1} + E_d^{q=0}) - (E_p^{q=0} + E_d^{q=-1/+1}). \quad (8)$$

Термические (E_{th}^e и E_{th}^h), а также оптические (E_{th}^e и E_{th}^h) энергии ионизации нейтрального дефекта оцениваются как в [27]:

$$E_{\text{th}}^{e/h} = (E_p^{q=-1/+1} + E_d^{q=+1/-1}) - (E_p^{q=0} + E_d^{q=0}), \quad (9)$$

$$E_{\text{opt}}^{e/h} = E_{\text{th}}^{e/h} + (E_d^{q=+1/-1} - E_d^{q=-1/+1}). \quad (10)$$

Здесь q – значение, отвечающее заряду суперячейки; $E_{d(q=0)}^{q=+1/-1}$ – полные энергии положительно/отрицательно заряженной дефектной суперячейки, рассчитанные для геометрии, соответствующей нейтральному дефекту.

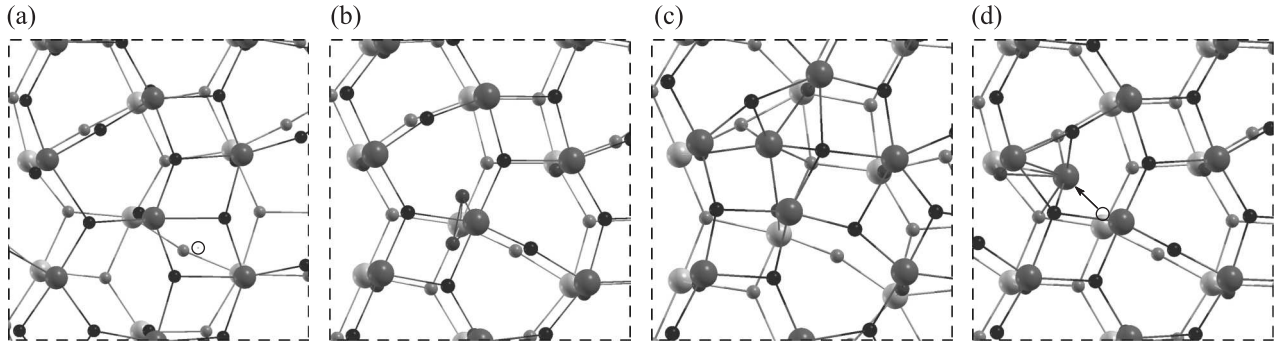


Рис. 1. Фрагменты структуры λ - Ta_2O_5 из двух слоев Ta_2O_3 и объединяющего их слоя O после добавления (a) вакансии O; (b) – междуузельного O; (c) – междуузельного Ta; (d) – Ta, замещающего O. Атомы O – маленькие круги; Ta – большие круги; вакансия O – пустой круг. Стрелкой обозначено смещение замещающего Ta

В настоящей работе моделируются все неэквивалентные позиции собственных дефектов в λ - Ta_2O_5 : по три позиции для O_{vac} и Ta_{subt} , и по четыре – для O_{int} и Ta_{int} . Ниже представлены результаты только для положений дефектов с наименьшей полной энергией структуры.

Энергетически выгодное положение вакансии O в плоскости Ta_2O_3 , причем в двухкратной координации (рис. 1a). Структурная релаксация слоя близка, но не аналогична наблюдаемой ранее [12, 15], что объясняется наличием для O_{vac} в λ - Ta_2O_5 многих локальных минимумов с близкими энергиями.

Для O_{int} , Ta_{int} и Ta_{subt} наиболее стабильное положение в кислородной плоскости (рис. 1b–d), ввиду того, что прилегающие слои Ta_2O_3 более плотно упакованы. O_{int} объединяется с атомом O кислородной плоскости в молекулу O_2 в синглетном состоянии (межатомное расстояние $d_{\text{O-O}} = 1.5 \text{ \AA}$), при этом оба атома равноудалены от ближайших атомов Ta ($d_{\text{O-Ta}} = 2.1 \text{ \AA}$). Ta_{int} приводит к существенной структурной релаксации прилегающих слоев Ta_2O_3 и оказывается координированным семью атомами O: тремя из кислородной плоскости и по два из смежных плоскостей Ta_2O_3 . Релаксация структуры с Ta_{subt} приводит лишь к смещению атома замещения без существенного влияния на прилегающие слои Ta_2O_3 . При этом замещающий Ta становится координированным пятью атомами O ($d_{\text{O-Ta}} \approx 2.1 \text{ \AA}$) и оказывается близок к двум атомам Ta смежных плоскостей ($d_{\text{O-Ta}} = 2.8 \text{ \AA}$).

Согласно расчетам, O-rich предел отвечает $\mu(\text{O}) = -4.9 \text{ эВ}$ (5), O-poor – $\mu(\text{O}) = -8.6 \text{ эВ}$ (6). Зависимость E_{form} от $\mu(\text{O})$ показывает, что в условиях обогащения кислородом наиболее энергетически выгодным в широком диапазоне химического потенциала кислорода является O_{int} . При $\mu(\text{O}) < -6.7 \text{ эВ}$ минимальная E_{form} у O_{vac} , а в условиях сильного

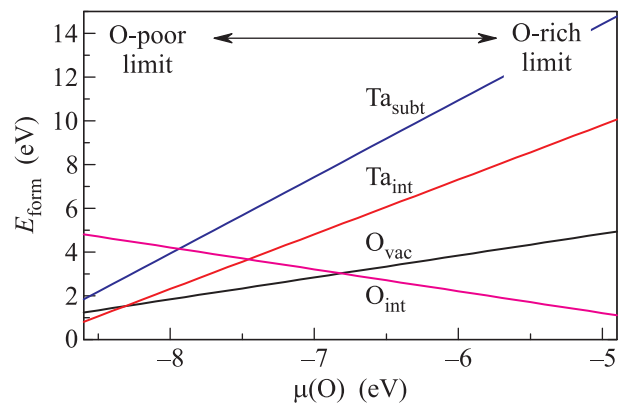


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость энергии формирования различных дефектов от $\mu(\text{O})$

кислородного обеднения – у Ta_{int} (рис. 2). Для вакансии кислорода в O-rich пределе полученное значение $E_{\text{form}} = 4.9 \text{ эВ}$ хорошо согласуется с другими расчетами [12–14], тогда как в O-poor пределе $E_{\text{form}} = 1.2 \text{ эВ}$ значительно превосходит значение 0.1 эВ , рассчитанное для аморфного Ta_2O_5 в [19]. Формирование Ta_{subt} наиболее энергозатратно практически во всем диапазоне $\mu(\text{O})$, из чего можно заключить, что возможная концентрация дефектов данного типа наименьшая по сравнению с другими собственными дефектами.

Интересным качественным результатом является то, что формирование Ta_{int} в условиях, характерных для Ta_2O_5 в элементах RRAM (обеднение кислородом и контакт с металлом), имеет сопоставимую энергозатратность с вакансией O. Это указывает на потенциально значимую роль междуузельного Ta в процессах резистивного переключения.

Расчетные спектры парциальной плотности состояний (“Projected Density of States” – PDOS) показывают, что все изученные дефекты, за исключе-

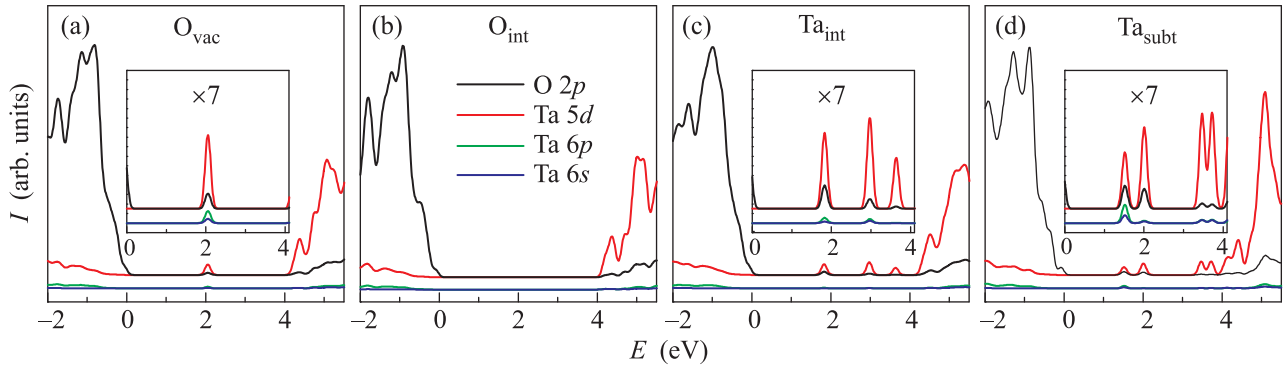


Рис. 3. (Цветной онлайн) PDOS спектры $\lambda\text{-Ta}_2\text{O}_5$: (a) – с вакансией O; (b) – междуузельным O; (c) – междуузельным Ta и (d) – Ta, замещающим O. Нуль энергии совпадает с E_v . Спектры O 2p/Ta 5d и Ta 6s/Ta 6p разнесены по вертикали

нием O_{int} , формируют состояния в запрещенной зоне $\lambda\text{-Ta}_2\text{O}_5$ (рис. 3). O_{vac} формирует один заполненный дефектный уровень на 2.1 эВ выше потолка валентной зоны E_v . Эта особенность хорошо известна для Ta_2O_5 , хотя в литературе можно найти значительный разброс положения уровня дефекта, обусловленный использованием различных моделей кристаллической структуры и методов расчета. Для той же вакансии O в $\lambda\text{-Ta}_2\text{O}_5$ ранее получено положение дефектного уровня на 2.3 эВ выше E_v [15].

Для Ta_{int} в запрещенной зоне $\lambda\text{-Ta}_2\text{O}_5$ наблюдается три уровня, причем два нижних (1.8 и 3.0 эВ от E_v) полностью заняты, а верхний, отстоящий от края зоны проводимости E_c на 0.5 эВ, заполнен одним электроном. Это объясняется тем, что Ta имеет пять валентных электронов, которые и заполняют дефектные уровни. Ta_{subt} формирует в запрещенной зоне четыре уровня дефекта, заполненных четырьмя электронами со спином вверх и тремя со спином вниз. Верхний, однократно заполненный уровень, находится на 0.4 эВ ниже E_c . Логично предположить, что в данном случае к пяти валентным электронам Ta добавляются два, которые остаются после “удаления” атома O из кислородной плоскости (рис. 1d). Таким образом, Ta_{subt} можно рассматривать как комбинацию O_{vac} и Ta_{int} .

Уровни в запрещенной зоне $\lambda\text{-Ta}_2\text{O}_5$ от рассчитанных собственных дефектов формируются Ta 5d электронными орбиталями с заметным вкладом O 2p. Малая ширина PDOS пиков (на рис. 3 спектры сглажены функцией Гаусса с полушириной $\sigma = 0.1$ эВ) указывает на локализацию заряда в пространстве. Следовательно, дефектные уровни формируются электронными орбиталями ближайших к дефекту атомов. Этот вывод согласуется с распределением зарядовой плотности для нейтральной вакансии O [12, 15, 19].

Для рассчитываемых дефектов, за исключением O_{int} , получены положительные значения энергии локализации электрона $\Delta\varepsilon^e$ и дырки $\Delta\varepsilon^h$ (табл. 1). Это значит, что захват и электрона, и дырки на эти дефекты энергетически выгоден, т.е. дефекты являются амфотерными. Таким образом, все типы собственных дефектов в $\lambda\text{-Ta}_2\text{O}_5$, которые приводят к обогащению металлом (т.е. к атомному отношению $[\text{O}]/[\text{Ta}] < 2.5$), могут выступать в качестве электронных и дырочных ловушек, и участвовать в транспорте заряда. Причем, судя по спектрам PDOS, Ta_{int} и Ta_{subt} имеют более сильное влияние на электронную структуру Ta_2O_5 , чем O_{vac} . Тем не менее, учитывая энергию образования собственных дефектов, можно ожидать, что только Ta_{int} в условиях кислородного обеднения может играть конкурентную с O_{vac} роль в проводимости. Интересно отметить, что в работе [28] теоретически было показано, что цепочка вакансий O в $\delta\text{-Ta}_2\text{O}_5$ не способна выступать в роли проводящего филамента, тогда как более богатые на дефектные состояния в запрещенной зоне междуузельные атомы Cu такой филамент формируют.

Для сравнения с имеющимися в литературе экспериментальными значениями для энергии ловушки в Ta_2O_5 были рассчитаны E_{opt} и E_{th} для O_{vac} , Ta_{int} и Ta_{subt} (табл. 1). Для пленок оксида тантала в литературе можно найти значения энергии ловушки (термической), определенной из транспортных измерений, в диапазоне 0.7–0.85 эВ [21, 29–32]. Значение $E_{\text{opt}} = 1.5$ эВ было получено из экспериментов по фотопроводимости [33], и 1.7 эВ – из моделирования вольт-амперных характеристик [21]. Как можно видеть из табл. 1, только значения E_{opt}^e и E_{th}^e для вакансии O находятся в разумном согласии с экспериментальными. Данный результат ожидаем и лишь подтверждает, что в стехиометрическом или близком к стехиометрическому Ta_2O_5 (т.е. в условиях, когда

вакансия О имеет минимальное значение E_{form} среди собственных дефектов, влияющих на транспорт) именно вакансия О является ключевым дефектом, ответственным за проводимость диэлектрика. Однако, согласно результатам настоящего исследования, можно ожидать, что для сильно обедненного кислородом Ta_2O_5 значения E_{opt}^e и E_{th}^e должны быть значительно меньше ввиду существенного включения в процессы транспорта междоузельного Та.

Таблица 1. Значения $\Delta\epsilon^e/\Delta\epsilon^h$, $E_{\text{opt}}^e/E_{\text{opt}}^h$ и $E_{\text{th}}^e/E_{\text{th}}^h$ (в эВ), рассчитанные согласно выражениям (8)–(10) для дефектов в $\lambda\text{-Ta}_2\text{O}_5$

	$\Delta\epsilon^e/\Delta\epsilon^h$	$E_{\text{opt}}^e/E_{\text{opt}}^h$	$E_{\text{th}}^e/E_{\text{th}}^h$
O_{vac}	0.4/3.3	1.9/3.8	0.7/3.6
Ta_{int}	0.3/4.2	0.1/4.1	0/3.9
Ta_{subt}	0.2/3.8	0.2/4.0	0.2/3.9

На точность представленных в табл. 1 данных, очевидно, сказывается использование структуры $\lambda\text{-Ta}_2\text{O}_5$, для которой имеется много локальных минимумов с близкими энергиями, но различной структурной релаксацией. Кроме того, на точность влияет способ учета компенсирующего фонового заряда, необходимого для возможности расчета заряженных систем в приближении периодической суперячейки. Тем не менее, за качественную и количественную ценность полученных результатов говорит то, что для всех дефектов расчеты осуществлялись по единой методике, и для вакансии О получено согласие с экспериментальными данными.

Итак, в настоящем исследовании было показано, что все точечные собственные дефекты в $\lambda\text{-Ta}_2\text{O}_5$, которые приводят к обогащению металлом, могут выступать в роли ловушки для электронов и дырок, и, таким образом, участвовать в формировании проводящего филамента RRAM структур. При этом наибольший вклад в проводимость близкого к стехиометрическому Ta_2O_5 вносит вакансия кислорода. В условиях сильного кислородного обеднения, характерных для элементов RRAM, междоузельные атомы тантала играют конкурирующую с вакансиями кислорода роль в транспортных свойствах оксида.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант # 17-72-10103. Моделирование осуществлялось на кластере НКС-1П Центра коллективного пользования “Сибирский суперкомпьютерный центр СО РАН” (ЦКП ССКЦ СО РАН).

1. A. C. Torrezan, J. P. Strachan, G. Medeiros-Ribeiro, and R. S. Williams, *Nanotechnology* **22**, 485203 (2011).

2. L. Goux, A. Fantini, Y.Y. Chen, A. Redolfi, R. Degraeve, and M. Jurczak, *ECS Solid State Lett.* **3**, Q79 (2014).

3. M. J. Lee, C. B. Lee, D. Lee, S. R. Lee, M. Chang, J. H. Hur, Y. B. Kim, C. J. Kim, D. H. Seo, S. Seo, U. I. Chung, I. K. Yoo, and K. Kim, *Nature Mater.* **10**, 625 (2011).

4. A. Prakash, D. Jana, and S. Maikap, *Nanoscale Res. Lett.* **8**, 418 (2013).

5. K. M. Kim, S. R. Lee, S. Kim, M. Chang, and C. S. Hwang, *Adv. Funct. Mater.* **25**, 1527 (2015).

6. F. Pan, S. Gao, C. Chen, C. Song, and F. Zeng, *Mat. Sci. Eng. Rep.* **83**, 1 (2014).

7. F. Miao, J. P. Strachan, J. J. Yang, M. X. Zhang, I. Goldfarb, A. C. Torrezan, P. Eschbach, R. D. Kelley, G. Medeiros-Ribeiro, and R. S. Williams, *Adv. Mater.* **23**, 5633 (2011).

8. H. Sawada and K. Kawakami, *J. Appl. Phys.* **86** 956 (1999).

9. R. Ramprasad, *J. Appl. Phys.* **94**, 5609 (2003).

10. Т. В. Перевалов, А. В. Шапошников, *ЖЭТФ* **143**, 1153 (2013).

11. Y. Yang, H. H. Nahm, O. Sugino, and T. Ohno, *AIP Adv.* **3**, 042101 (2013).

12. Y. Z. Guo and J. Robertson, *Appl. Phys. Lett.* **104**, 112906 (2014).

13. H. Jiang and D. A. Stewart, *J. Appl. Phys.* **119**, 134502 (2016).

14. L. G. Zhu, J. Zhou, Z. L. Guo, and Z. M. Sun, *J. Phys. Chem. C* **120**, 2456 (2016).

15. Y. Z. Guo and J. Robertson, *Microelectronic Engineering* **147**, 254 (2015).

16. R. J. Bondi, M. P. Desjarlais, A. P. Thompson, G. L. Brennecke, and M. J. Marinella, *J. Appl. Phys.* **114**, 203701 (2013).

17. B. Xiao and S. Watanabe, *Nanoscale* **6**, 10169 (2014).

18. J. Lee, W. D. Lu, and E. Kioupakis, *Nanoscale* **9**, 1120 (2017).

19. Y. Z. Guo and J. Robertson, *Appl. Phys. Lett.* **105**, 223516 (2014).

20. M. V. Ganduglia-Pirovano, A. Hofmann, and J. Sauer, *Surf. Sci. Rep.* **62**, 219 (2007).

21. V. A. Gritsenko, T. V. Perevalov, V. A. Voronkovskii, A. A. Gismatulin, V. N. Kruchinin, V. S. Aliev, V. A. Pustovarov, I. P. Prosvirin, and Y. Roizin, *ACS Appl. Mater. Inter.* **10**, 3769 (2018).

22. S. Clima, Y. Y. Chen, C. Y. Chen, L. Goux, B. Govoreanu, R. Degraeve, A. Fantini, M. Jurczak, and G. Pourtois, *J. Appl. Phys.* **119**, 225107 (2016).

23. S. H. Lee, J. Kim, S. J. Kim, S. Kim, and G. S. Park, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 235502 (2013).

24. P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme et al. (Collaboration), *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 465901 (2017).

25. V. A. Shvets, V. S. Aliev, D. V. Gritsenko, S. S. Shaimeev, E. V. Fedosenko, S. V. Rykhlitski, V. V. Atuchin, V. A. Gritsenko, V. M. Tapilin, and H. Wong, *J. Non-Cryst. Solids* **354**, 3025 (2008).
26. A. S. Foster, F. Lopez Gejo, A. L. Shluger, and R. M. Nieminen, *Phys. Rev. B* **65**, 174117 (2002).
27. D. Munoz Ramo, J. L. Gavartin, A. L. Shluger, and G. Bersuker, *Phys. Rev. B* **75**, 205336 (2007).
28. T. K. Gu, T. Tada, and S. Watanabe, *ACS Nano*. **4**, 6477 (2010).
29. K. V. Egorov, D. S. Kuzmichev, P. S. Chizhov, Y. Y. Lebedinskii, C. S. Hwang, and A. M. Markeev, *ACS Appl. Mater. Inter.* **9**, 13286 (2017).
30. W. S. Lau, L. L. Leong, T. J. Han, and N. P. Sandler, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 2835 (2003).
31. M. Houssa, R. Degraeve, P. W. Mertens, M. M. Heyns, J. S. Jeon, A. Halliyal, and B. Ogle, *J. Appl. Phys.* **86**, 6462 (1999).
32. M. Houssa, M. Tuominen, M. Naili, V. V. Afanas'ev, A. Stesmans, S. Haukka, and M. M. Heyns, *J. Appl. Phys.* **87**, 8615 (2000).
33. J. H. Thomas, *Appl. Phys. Lett.* **22**, 406 (1973).