

**Sűrűségfunkcionál-elméleten alapuló
elektronszerkezet-számítások a gyakorlatban
fontos ponthibákra szilíciumkarbidban,
szilíciumkarbid nanocsövekben és gyémántban**

című

MTA Doktori Értekezés
Tézisei

Gali Ádám

2010

1. Kitűzött feladatok és előzményük

A disszertációban elektronszerkezet-számításaim eredményeit az alábbi három tématerületen ismertetem: 1) a szilíciumkarbid tömbben előforduló ponthibák, 2) a szilíciumkarbid nanocsövek lehetséges adalékolása, 3) a gyémántbeli nitrogén-vakancia hiba részletes analízise. A három alkalmazási terület más-más szempontból fontos.

1. Máig a szilíciumtechnológia a leginkább elterjedt az elektronikai iparban. A szilícium alapú processzorokat – a működés közben keletkező hő elvezetése mellett – jól lehet használni szobahőmérsékleten. Az ipari és más gyakori felhasználásokban (pl. autómotorokban) azonban, – a jóval magasabb az üzemi hőmérséklet miatt – a szilícium nem megfelelő félvezető alapanyag. A szilíciumkarbid széles tiltotsávú anyagként az egyik legnagyobb reményű alternatíva, azonban technológiája közel sem annyira kiforrott, mint a szilíciumé.

A megbízható mikroelektronikai eszközök jó kihozatalú gyártásához elengedhetetlen a félvezető anyag szerkezeti hibái és szennyezései hatásának kézben tartása a technológia minden egyes lépésében. Ehhez szükség van a ponthibák alapvető tulajdonságainak és egymással való lehetséges reakcióinak részletes ismeretére. A szilíciumkarbidban még az alapvető szerkezeti ponthibák tulajdonságai is ismeretlenek voltak tíz évvel ezelőtt. A ponthibák tulajdonságainak feltárásában a különböző spektroszkópai módszerek (kiemelten: fotolumineszcencia, mélynívó-tranzies, elektron paramágneses rezonancia) sokat segíthetnek, azonban ezekkel a módszerekkel jellemzően a ponthibák jelenlétét és hozzákapcsolt tulajdonságokat lehet kimutatni, viszont a pontos eredetüket nem. A kísérletekben észlelt jelek interpretálásában, a különböző ponthibák közötti reakciók előrejelzésében a pontos atomi szintű szimulációknak nagy szerepe van. A disszertációmban két problémakört jártam körül.

A különböző részecskékkel bombázott szilíciumkarbidban keletkező ponthibák, és azok lehetséges reakcióinak vizsgálata nagy fontosságú ahhoz, hogy megértsük, hogy az implantálással adalékolt szilíciumkarbidban milyen folyamatok játszódnak le, és emellett esetleg információt nyerhetünk az alapvető szerkezeti hibák tulajdonságait illetően is.

A szilíciumkarbid-alapú elektronikai eszközökben a nagyellenállású hordozó szilíciumkarbidszeletek előállítása nehézségekbe ütközött, amit mély nívóval rendelkező, kompenzáló ponthibák bejuttatásával tudtak megoldani. Ezen ponthibák eredete ismeretlen volt, emiatt a technológia optimalása szempontjából elengedhetetlen volt azok felderítése.

2. A nanoelektronika és nagyérzékenységű szenzorok kifejlesztése újszerű megoldásokat tesz szükségessé. Friss elméleti kutatások kimutatták, hogy az egyfalú SiC nanocsövek félvezetők függetlenül a szerkezetüktől, szemben a szén nanocsövekkel. Ennek oka, hogy a kicsit ionos Si-C kötés mindig létrehozza a tiltotsávot. Ráadásul bizonyos szerkezetű SiC nanocsövek ún. direkt sávúak, ami azt jelenti, hogy ugyanazzal a kvázi-impulzussal rendelkezik a vezető elektron és a lyukállapot. Ez elvileg alkalmassá teheti optoelektronikai eszköz (világító diódák, stb.) alapanyagaként történő felhasználását. Ezekben az alkalmazásokban az adalékolás kulcsfontosságú, ezért vizsgálatokat végeztem az SiC nanocsövek területszelektív adalékolásának témájában.
3. Az előző pontokban hagyományosnak tekinthető félvezető alkalmazásokat tárgyaltam, ahol az elektronok árama adja, illetve szállítja az információt. A közelmúltban azonban javasoltak egy ettől lényegesen eltérő koncepciót, ahol az információt a spinállapotok tárolják, és ráadásul ezek a spinállapotok szuperpozíciós állapotban lehetnek (kvantumbitek), amivel gyorsabb számításokat lehet végezni, mint a hagyományos digitális számítógépek bitjeivel. A kvantumbitek fizikai megvalósítása a fizika viszonylag új és nagy éréklődésre számottartó területe.

Szobahőmérsékleten működő, szilárdtestbeli kvantumbitek megvalósítására az egyik legjobb jelölt a gyémántbeli egyszeresen negatívan töltött nitrogén-vakancia hiba, amelynek az a különleges tulajdonsága van, hogy nagyspinű alapállapottal rendelkezik, és a spinállapotát optikai módon is lehet manipulálni. Bár ezt a hibát rendkívül intenzíven vizsgálták különböző kísérleti módszerekkel az elmúlt öt évben és nagyon sok spintronikai alkalmazást demonstráltak vele, ennek ellenére a gerjesztés folyamata, valamint a mágneses tulajdonságainak (mint például az elektronspin és magspin közötti hiperfinomkölcsönhatás) részletei ismeretlenek maradtak. Ezeknek jobb megértése elengedhetetlen a spintronikai alkalmazások optimálása céljából, amihez számításaimmal kívántam hozzájárulni.

A negatív töltést az izolált helyettesítéses nitrogén szennyezések biztosítják a nitrogén-vakancia hibában, amelynek szabályozott létrehozása nehéz feladat. Emiatt célszerűnek tűnt megvizsgálni, hogy a semleges nitrogén-vakancia hiba, – melynél a fenti probléma elkerülhető – használható-e spintronikai alkalmazásokban. Számításaimmal ezt a kérdést terveztem megválaszolni.

2. Vizsgálati módszerek

A ponthibákat az ún. szupercella-módszerrel modelleztem, ahol a szupercella a befogadó kristályos anyag primitívcellájának többszöröse, amelyre alkalmazható a sávszerkezetszámítás. A sávszerkezetet olyan – a Brillouin-zónába eső – reprezentáns reciprokrácspontokban számítottam ki, ami konvergens fizikai mennyiségeket adott. A rendszer teljesenergiáját, elektronszerkezetét, geometriáját, rezgési frekvenciáját, valamint hiperfinomtenzorait sűrűségfüggvény-elméleten alapuló módszerekkel számítottam ki. A ponthibák geometriájának, rezgési frekvenciájának és hiperfinomtenzorainak számításában jellemzően standard ún. LDA és GGA módszereket használtam. Ezek a módszerek nem adnak pontos elektronszerkezetet a módszerekben alkalmazott közelítések miatt. Ennek kiküszöbölésére a világon elsőként használtam ún. hibridfüggvényeket, amelyekkel nem csak a tökéletes félvezető kristályok tiltotsávját, hanem a tiltotsávba eső hibaszintek helyzetét is sokkal pontosabban megkaptam, mint standard függvények alkalmazásával. Ez különösen fontos újítás volt a széles tiltotsávú félvezetők vizsgálatában, mint a disszertációban szereplő szilíciumkarbid és gyémánt, ahol a standard függvényekkel a hiba elérheti az 1 eV-t is.

A számításokat nyilvános elérésű vagy a külföldi partnerekkel történő együttműködésen keresztül elérhető programcsomagokkal végeztem el. A programcsomagokhoz több ezer sornyi programot írtam, amellyel jellemzően a számításokban kapott eredményeket lehetett kiértékelni, illetve kisebb mértékben bizonyos módszereket beültettem a meglévő programcsomagokba. A számítások végrehajtása rendkívül számításigényes feladat volt, amit jellemzően szuperszámítógépek segítségével tudtam elvégezni. A legmodernebb külföldi szuperszámítógépeket a kísérleti csoportokkal való együttműködés keretében tudtam elérni sikeres pályázatok útján. Általában jellemző volt munkámra, hogy a kísérleti csoportokkal szorosan együttműködtem: a számításokkal kapott jóslataimat megosztottam az együttműködő kísérleti partnerekkel, amiket a kísérleti csoportok méréseikkel igazoltak, és az így kapott végeredményeket jellemzően közösen, egy közleményben publikáltuk.

3. Új tudományos eredmények és hozzá kapcsolódó publikációk

1. A hidrogénnel bombázott szilíciumkarbidban (SiC) egyrészt információt nyerhetünk az implantációval adalékolt SiC-ben keletkező hibákról, másrészt a hidrogén jelenlétéhez kapcsolódó parazita hibák ujjlenyomatát is megkaphatjuk spektroszkópai eszközökkel.

Ezzel kapcsolatos eredményemet az alábbi tézispontban adom közre:

- (a) Sűrűségfukcionál-elméleten alapuló számításokkal igazoltam, hogy a hidrogénnel bombázott szilíciumkarbidban szilíciumvakanciából és hidrogénből álló komplexum jön létre. A komplexum jelenlétét a komplexum számított rezgési spektrumából következtettem ki, ahol megjósoltam a nyújtó rezgési módusok anharmonicitását. A megjósolt anharmonikus tagot fotolumineszcencia (PL) mérésekkel igazolták az ún. „C-H” centrumban. [1]
2. Az implantációval adalékolt SiC-ben hibák keletkeznek a rács roncsolása következtében, amelyet hőkezeléssel próbálnak újrakristályosítani. A viszonylag nagyenergiájú elektronnal besugárzott mintákban hasonló jelenségek játszódhatnak le, mint az implantáció során: hibák keletkeznek, amelyek koncentrációját hőkezeléssel lehet csökkenteni. A besugárzott mintákban kapott tapasztalatok sokat segíthetnek a félvezető technológia optimalásában. A besugárzott mintákban tipikusan vakanciák és (ön)intersticiális hibák keletkeznek. Sűrűségfukcionál-elméleten alapuló számításokat végeztem a szén önintersticiálisok és antisite-ok komplexumaira a szilíciumkarbidban. *Itt kiemelem, hogy a szilárdtestben előforduló hibákat a világon elsőként vizsgáltam ún. hibridfukcionál-módszerekkel, amellyel pontosabban számíthatóak az ionizációs energiák, mint a standard DFT-módszerekkel.* A számításaim eredményei – számos – a besugárzott szilíciumkarbidban lejátszódó atomi folyamatot tártak fel. Ezzel kapcsolatos tézispontjaim a következők:
- (a) Megmutattam, hogy a szén önintersticiálisok termikusan stabil aggregátumokat hoznak létre egymással, illetve a szén antisite hibával. A számítások alapján megjósoltam, hogy a besugárzott mintákban a hőkezelési hőmérséklet függvényében szén klaszterek jöhetnek létre, illetve disszociálhatnak. Ennek következtében a nagy stabilitású szén klaszterekből mozgékony szén intersticiálisok léphetnek ki magas hőmérsékletű hőkezelés során, amelyek a még létező vakanciákkal gyorsan rekombinálhatnak hozzájárulva a vakanciák koncentrációjának csökkentéséhez, egyben folytonosan átmeneti, gyorsan összeálló, majd disszociáló, szén klasztereket hozhatnak létre egymással, amíg véglegesen ki nem diffundáltak a mintából. [2]
 - (b) A számítások alapján elsőként megjósoltam a termikusan stabil kétszénatomos antisite hiba (két szén atom kerül a szilícium atom helyére) jelenlétét a SiC-ben. Számításaim alapján a hiba elektromosan aktív, amelyet pozitívan és negatívan is

lehet ionizálni. A semleges hiba rezgési frekvenciáját, valamint több töltésállapotban a hiba hiperfinom aktív izotópjainak hiperfinomállandóját is kiszámítottam. A számítások alapján azt jósoltam, hogy a $6H$ SiC-beli ún. P-T PL centrum a semleges hibához köthető. Feltevésemet kísérletileg igazolták. Számításaimmal megmutattam, hogy a negatívan töltött esetekben a $4H$ SiC-ben a köbös és hexagonális konfiguráció lényegesen eltérő geometriát ad, amely így különböző hiperfinomállandókat ad a komplexum központja körül elhelyezkedő hiperfinom aktív izotópokra. Jóslataimat elektron paramágneses rezonancia (EPR) kísérletekkel igazolták (az ún. $HEI5/6$ centrumokban), ahol az eltérő konfigurációkat valóban megkapták. [2,3]

- (c) Egy bonyultabb, antisite és intersticiális szén atomokból álló komplexum jelenlétét jósoltam meg nagyenergiájú besugárzott SiC mintákban, amellyel az ún. D_{II} PL centrum eredete jól magyarázható. Jelenleg az általam megadott komplexum az elfogadott modell a D_{II} centrum eredetére. [2]
- (d) Megmutattam, hogy a szén önintersticiális és antisite hibák metastabil komplexumokat is létrehozhatnak, amelyek közül az egy szén antisite-ból és két intersticiális szén atomból alkotott gyűrű alakú komplexum jóslatom szerint az egyik legfontosabb elektroncsapdaként működik a SiC-ben, amely az ún. Z_1/Z_2 mélynívó tranzien spektruskópia (DLTS) centrummal korrelál. A legújabb kísérleti eredmények igazolják feltevésemet. [4]
- (e) Az egyik legstabilabb elektromosan aktív hiba az ún. D_I PL centrum, amelynek eredete több mint három évtizede ismeretlen. A világon elsőként mutattam meg, hogy a fenti centrum eredete antisite jellegű hiba kell legyen. A szilícium és C_{Si} szén antisite pár komplexum számított elektronszerkezete és rezgési frekvenciái jól korrelálnak a D_I mért tulajdonságaival, ahol a Si-antisite felelős az elektromos aktivitásért és a mért lokális rezgési módusokért. [5,6]

3. Az akaratlanul adalékolt szilíciumkarbid (SiC) mintákba olyan hibákat juttatnak be, amellyel az adalékolás hatását kompenzálni lehet, és így nagy ellenállású SiC félvezetőt lehet létrehozni. Ezeket a kompenzált mintákat „félszigetelőknek” nevezik. A félszigetelő mintákban a kompenzáló hibák eredete ismeretlen volt. Sűrűségfunkcionálméleten alapuló számításokkal a legfontosabb kompenzáló hibákat felderítettem. Ezzel kapcsolatos tézispontjaim a következők:

- (a) A világon először sikerült bebizonyítani az egyik legalapvetőbb hiba, az antisite-

vakancia (AV) pár létezését egy vegyületfélvezetőben. Bebizonyítottam, hogy az ún. SI5 EPR centrum a negatívan töltött szén AV pár, amely egyben az egyik legfontosabb kompenzáló centrum a $4H$ SiC félszigetelő mintákban. A pozitívan töltött szén AV párt szintén megvizsgáltam. Megmutattam, hogy a tisztán köbös és hexagonális helyeken (C_{3v} szimmetria) a szén antisite eltérő módon relaxál, amely mérhető különbséget okoz a hiperfinomállandójában. Számításaimmal azt is megmutattam, hogy a köbös-hexagonális/hexagonális-köbös konfigurációiban (C_{1h} szimmetria) az alacsony szimmetria következtében több szilícium szomszéd hiperfinomállandója mérhető ki, mint a C_{3v} konfigurációkban. Számításaim eredményeit EPR mérésekkel igazolták. [7,8]

- (b) Számításaimmal bizonyítottam, hogy a semleges divakancia fontos kompenzáló hiba félszigetelő $4H$ SiC mintákban. A számítások alapján a hiba alapállapota a magas $S=1$ spinű állapot, amely alacsony hőmérsékleten gerjesztés nélkül is észlelhető EPR mérésekkel. Meghatároztam a semleges divakancia különböző konfigurációiban a hiba centrumához közel eső atomokon a hiperfinomtenzorokat. A számítások eredményeit EPR mérésekkel igazolták, sikeresen azonosítva az egyes konfigurációkat. [9,10]

4. Kutatásaim során megvizsgáltam az egzotikus tulajdonságokat mutató egyfalú szilíciumkarbid nanocsöveket. Ezen nanocsövek, szemben a szén nanocsövekkel, néhány kivételtől eltekintve univerzális félvezető tulajdonságot mutatnak. Ez számos lehetőséget nyújt részben nanoelektronikai, részben szenzor alkalmazásokra. Mindkét esetben fontos, hogy a nanocső vezetőképességét szabályozni tudjuk. Kutatásaim nagyrészt a félvezető SiC nanocsövek adalékolására irányultak. Ezzel kapcsolatos tézispontjaim a következők:

- (a) LDA és hibridfunkcionálok használatával megvizsgáltam a nitrogénnel és bórral adalékolt (8,0) karosszék és (6,6) cikkcakkos egyfalú szilíciumkarbid nanocsöveket. Számításaim alapján a nitrogén viszonylag mély ($\sim 1,6$ eV) donorszinteket hoz létre a (6,6) nanocsőben, míg viszonylag sekély ($\sim 0,3$ eV) donorszinteket a (8,0) nanocsőben. A bór mind a szén, mind a szilíciumot is helyettesítheti. A szén helyén viszonylag mély ($\sim 0,6$ eV), a szilícium helyén viszonylag sekély ($\sim 0,3$ eV) akceptorszinteket hoz létre mind a (6,6) és (8,0) nanocsövekben. [11]
- (b) LDA és hibridfunkcionálok használatával megvizsgáltam a hidrogén tulajdonságait a tökéletes, illetve a nitrogénnel és bórral adalékolt (8,0) karosszék és (6,6)

cikkcakkos egyfalú szilíciumkarbid nanocsövekben. A szimulációk szerint NH, illetve BH gázt tartalmazó közegben a nitrogén azonnal beépül úgy, hogy a hidrogén kis gátenergiával leszakad róla. A hidrogén együtt épül be a bórral a mély bór és a sekély bór hibát létrehozva a SiC nanocsőben. Amíg az első esetben a mély bór akceptort passziválja a hidrogén, addíg a második esetben a sekély bórról azonnal disszociál a hidrogén. Ez azt jelenti, hogy mind a nitrogén donor, mind a sekély bór akceptort be lehet juttatni a SiC nanocsőbe. Számításaim jóslata szerint a SiC félvezető nanocsövek n és p típusú adalékolása lehetséges nitrogént és bórt tartalmazó gázok alkalmazásával. Ezzel lehetővé válik, hogy terület-szelektíven befolyásoljuk a SiC nanocsövekehez tapadó molekulák kötési energiáját. Ez különösen fontos lehet később a biológiai molekulák vizsgálatánál. Másrészt a félvezető SiC nanocső adalékolása a nanoelektronikai felhasználást is lehetővé teszi elméletileg. [12]

- (c) Számításaim szerint a H_2 molekula csak kis valószínűséggel bomlik fel és köt a SiC nanocsövekhez. Ugyanakkor az atomi hidrogén szinte teljesen beépül a SiC nanocsövekbe, de közel egyforma valószínűséggel köt a donor állapotot létrehozó szénhez, vagy az akceptor állapotot létrehozó szilíciumhoz. Ezek egymást kompenzálják, és emiatt az SiC nanocső vezetőképessége nem változik. Számításaim szerint a SiC nanocső nem használható a hidrogén közvetlen elektromos detektálására. [12]

5. A nitrogén-vakancia hiba az egyik legnagyobb reményű jelölt a *szobahőmérsékleten* is működő, szilárdtestben létrehozott kvantumbitek megvalósítására. Emellett a hibát ultranagy érzékenységgű magnetométerként lehetne használni. Bár eddig számos esetben demonstrálták a hiba ezen alkalmazásait, ennek ellenére a hiba elektronszerkezete és egyéb tulajdonságai részleteiben nem ismertek. Ezzel kapcsolatos eredményeimet az alábbiakban foglaltam össze:

- (a) LDA és PBE sűrűségfukcionálok használatával kiszámítottam a negatívan töltött nitrogén-vakancia hiba hiperfinom állandóit alapállapotban. A számított hiperfinomállandók jó egyezést mutattak a korábban mért EPR spektrummal, illetve sikeresen jósoltam meg a hiba centrumától távolabbra eső ^{13}C izotópok hiperfinomállandóit. Megmutattam, hogy alapállapotban a ^{15}N izotóp hiperfinomállandója pozitív előjelű. Megmutattam, hogy a különböző ^{13}C izotópok hiperfinomállandói az optikai gerjesztés hatására megváltoznak, és a ^{13}C izotópok helyétől függően a hiperfinomtenzorok orientációja is megváltozik. [13-15]

- (b) Az ún. HSE06 hibridfunkcionál használatával nagy pontossággal meghatároztam a negatívan töltött nitrogén-vakancia hiba gerjesztési energiáját mind a fonon nélküli, mind a fonon-segített esetekre. A számítások alapján bebizonyítottam, hogy konfokális lencsével végzett kísérletek esetén a hiba a gerjesztett rezgésállapotából relaxál az alapállapotba alacsony hőmérsékleten. [16,17]
- (c) LDA sűrűségfunkcionál használatával kiszámítottam a semleges nitrogén-vakancia hiba hiperfinom állandóit a kvartett gerjesztett állapotában. A számítások alapján azonosítottam egy korábbi EPR centrumot ezzel a hibával. Számításaimban magyarázatot adtam arra, hogy a dublett alapállapotot miért nem észlelik EPR mérésekkel. Csoportelméleti megfontolásokat használva megmagyaráztam, hogy optikai gerjesztés során hogyan észlelhető a hiba kvartett gerjesztett állapota EPR mérésekkel. Megadtam egy olyan protokollt, amellyel elvileg lehetséges a semleges nitrogén-vakancia hiba gerjesztett kvartett elektronspinjét és a környező hiperfinomaktív izotópok magspinjét kvantumbitek létrehozására használni. [18]

A tézispontokhoz kapcsolódó közleményeim

(a független hivatkozások száma 2009 végéig, 2008-as „impact factor”-ral a legfrissebb közlemények esetén)

1. Gali A, Aradi B, Heringer D, Choyke WJ, Devaty RP, Bai S
Anharmonicity of the C-H stretch mode in SiC: Unambiguous identification of hydrogen-silicon vacancy defect.
APPLIED PHYSICS LETTERS 80:(2) pp. 237-239. (2002)
idézettség: 9 „impact factor”: 4.207
2. Gali A, Deak P, Ordejon P, Son NT, Janzen E, Choyke WJ
Aggregation of carbon interstitials in silicon carbide: A theoretical study.
PHYSICAL REVIEW B CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS 68:(12) p. 125201. (2003)
idézettség: 23 „impact factor”: 2.962
3. Umeda T, Isoya J, Morishita N, Ohshima T, Janzén E, Gali A
Dicarbon antisite defect in n-type 4H-SiC
PHYSICAL REVIEW B CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS 79:(11) p. 115211. (2009)
idézettség: - „impact factor”: 3.322

-
4. Gali A, Son NT, Janzen E
Electrical characterization of metastable carbon clusters in SiC: A theoretical study
PHYSICAL REVIEW B CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS 73:(3) p. 033204. (2006)
idézettség: 4 „impact factor”: 3.187
 5. Gali A, Deak P, Rauls E, Son NT, Ivanov IG, Carlsson FHC, Janzen E, Choyke WJ
Anti-site pair in SiC: a model of the D-I center.
PHYSICA B CONDENSED MATTER 340: pp. 175-179. (2003)
idézettség: 1 „impact factor”: 0.908
 6. Gali A, Deak P, Rauls E, Son NT, Ivanov IG, Carlsson FHC, Janzen E, Choyke WJ
Correlation between the antisite pair and the D-I center in SiC.
PHYSICAL REVIEW B CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS 67:(15) p. 155203. (2003)
idézettség: 25 „impact factor”: 2.962
 7. Umeda T, Son NT, Isoya J, Janzen E, Ohshima T, Morishita N, Itoh H, Gali A, Bockstedte M
Identification of the carbon antisite-vacancy pair in 4H-SiC.
PHYSICAL REVIEW LETTERS 96:(14) p. 145501. (2006)
idézettség: 7 „impact factor”: 7.072
 8. Umeda T, Ishoya J, Ohshima T, Morishita N, Itoh H, Gali A
Identification of positively charged carbon antisite-vacancy pairs in 4H-SiC
PHYSICAL REVIEW B CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS 75:(24) p. 245202. (2007)
idézettség: 2 „impact factor”: 3.172
 9. Son NT, Umeda T, Isoya J, Gali A, Bockstedte M, Magnusson B, Ellison A, Morishita N, Ohshima T, Itoh H, Janzen E
Divacancy Model for P6/P7 Centers in 4H- and 6H-SiC.
MATERIALS SCIENCE FORUM 527-229 pp. 527-530. (2006)
idézettség: 1 „impact factor”: -
 10. Son NT, Carlsson P, ul Hassan J, Janzen E, Umeda T, Isoya J, Gali A, Bockstedte M, Morishita N, Ohshima T, Itoh H
Divacancy in 4H-SiC.
PHYSICAL REVIEW LETTERS 96:(5) p. 055501. (2006)
idézettség: 10 „impact factor”: 7.072

11. Gali A
 Ab initio study of nitrogen and boron substitutional impurities in single-wall SiC nanotubes
 PHYSICAL REVIEW B CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS 73:(24) p. 245415. (2006)
idézettség: 25 „*impact factor*”: 3.187

12. Gali A
 Ab initio theoretical study of hydrogen and its interaction with boron acceptors and nitrogen donors in single-wall silicon carbide nanotubes
 PHYSICAL REVIEW B CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS 75:(8) p. 085416. (2007)
idézettség: 7 „*impact factor*”: 3.172

13. Gali A, Fyta M, Kaxiras E
 Ab initio supercell calculations on nitrogen-vacancy center in diamond: Electronic structure and hyperfine tensors
 PHYSICAL REVIEW B CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS 77:(15) p. 155206. (2008) with **Editor's Suggestion**
idézettség: 15 „*impact factor*”: 3.322

14. Gali A
 Hyperfine tensors of nitrogen-vacancy center in diamond from *ab initio* calculations
<http://arxiv.org>; arXiv:0905.1169
idézettség: 1 „*impact factor*”: -

15. Gali A
 Identification of individual ^{13}C isotopes of nitrogen-vacancy center in diamond by combining the polarization studies of nuclear spins and first-principles calculations
 PHYSICAL REVIEW B CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS 80 p. 241204(R) (2009). **Rapid Communication**
idézettség: - „*impact factor*”: 3.322

16. Gali A, Kaxiras E
 Comment on "Ab Initio Electronic and Optical Properties of the N-V- Center in Diamond"
 PHYSICAL REVIEW LETTERS 102:(14) p. 149703. (2009)
idézettség: 2 „*impact factor*”: 7.180

17. Gali A, Janzén E, Deák P, Kresse G, Kaxiras E
 Theory of Spin-Conserving Excitation of the N-V- Center in Diamond
 PHYSICAL REVIEW LETTERS 103:(18) p. 186404. (2009)
idézettség: 2 „*impact factor*”: 7.180

18. Gali A

Theory of the neutral nitrogen-vacancy center in diamond and its application to the realization of a qubit

PHYSICAL REVIEW B CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS 79:(23) p. 235210. (2009)

idézetség: - „*impact factor*”: 3.322

4. Az eredmények visszhangja, hasznosulása

A tömbi szilíciumkarbidban kapott számításaimban számos pontot sikerült azonosítanom, illetve rámutatnom az ott lejátszódó atomi folyamatokra. Ezek az eredmények egyértelműen hozzájárultak ahhoz, hogy pl. az ún. fél-szigetelő szilíciumkarbid előállítási technológiáját optimalni lehessen. Több összefoglaló cikk és előadás megtartására kértek fel az eredményeimnek köszönhetően. A szilíciumkarbid nanocsövek témában elért eredményeimet egy NATURE MATERIALS összefoglaló cikkben idézték. A kvantumbitek megvalósításában fontos gyémántbeli nitrogén-vakancia hibát nemrég kezdtem el vizsgálni, és néhány fontos – a számításaim segítségével tisztázott tény – hozzájárulhat a spintronikai alkalmazások optimalásához. Ezt jelzi, hogy több PHYSICAL REVIEW LETTERS cikkben idézték ezzel kapcsolatos publikációimat. Eredményeimnek köszönhetően a téma egyik legnevesebb kutatója, Prof. JÖRG WRACHTRUP professzor felkért arra, hogy a nitrogén-vakancia hibával kapcsolatos összefoglaló kiadványba írjak egy fejezetet.