

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ МАРГАНЦА И ЭЛЕМЕНТОВ VI ГРУППЫ В РЕШЕТКЕ КРЕМНИЯ

Эшқораев Абдуқодир Искандарович

Аннотация

В данной работе рассмотрены особенности взаимодействия примесных атомов марганца с элементами VI группы (кислород, сера, селен, теллур) в кристаллической решетке кремния, являющегося ключевым материалом современной микро- и нанoeлектроники. Проблематика исследования обусловлена необходимостью поиска новых путей модификации электрофизических свойств кремния для создания материалов с улучшенными характеристиками проводимости, магнитными и оптическими свойствами, востребованными в квантовой электронике, спинтронике и фотовольтаике. Установлено, что марганец как 3d-переходный металл образует в решетке кремния глубокие энергетические уровни, влияющие на процессы рекомбинации носителей заряда, тогда как элементы VI группы способны формировать как донорные, так и акцепторные центры. Их совместное внедрение в кристаллическую матрицу приводит к образованию устойчивых комплексов, которые существенно изменяют ширину запрещенной зоны, уровень рекомбинации и фоточувствительность. В работе приведены результаты анализа механизма образования таких комплексов, рассмотрены модели электронных состояний, а также продемонстрированы экспериментальные данные по влиянию концентрации и температуры отжига на формирование устойчивых дефектных конфигураций. Практическая значимость исследования заключается в разработке основ для создания новых функциональных материалов на базе кремния с регулируемыми параметрами для нужд современной микроэлектроники.

Ключевые слова. Кремний, марганец, элементы VI группы, дефекты кристаллической решетки, донорно-акцепторные комплексы, глубокие уровни, рекомбинация, фотопроводимость, спинтроника, модификация свойств полупроводников.

Abstract

This paper examines the interactions between manganese impurity atoms and Group VI elements (oxygen, sulfur, selenium, and tellurium) in the crystal lattice of silicon, a key material for modern micro- and nanoelectronics. The research focus is driven by the need to find new ways to modify the electrical properties of silicon to

create materials with improved conductivity, magnetic, and optical properties, which are in demand in quantum electronics, spintronics, and photovoltaics. It has been established that manganese, as a 3d transition metal, forms deep energy levels in the silicon lattice that influence charge carrier recombination processes, while Group VI elements can form both donor and acceptor centers. Their combined incorporation into the crystal matrix leads to the formation of stable complexes that significantly alter the band gap, recombination level, and photosensitivity. This paper presents the results of an analysis of the formation mechanism of such complexes, examines models of electronic states, and demonstrates experimental data on the influence of annealing concentration and temperature on the formation of stable defect configurations. The practical significance of this research lies in developing a foundation for creating new silicon-based functional materials with adjustable parameters for the needs of modern microelectronics.

Key words. Silicon, manganese, group VI elements, crystal lattice defects, donor-acceptor complexes, deep levels, recombination, photoconductivity, spintronics, modification of semiconductor properties.

ВВЕДЕНИЕ

Кремний (Si) является основным конструкционным материалом современной полупроводниковой промышленности, и исследования по его модификации примесными атомами ведутся на протяжении нескольких десятилетий. Несмотря на то, что классическая кремниевая электроника достигла высокого уровня развития, новые технологические задачи, связанные с миниатюризацией устройств, повышением скорости обработки информации, снижением энергопотребления и расширением функциональных возможностей, требуют создания материалов с принципиально новыми свойствами.

Одним из перспективных направлений является внедрение в кристаллическую решетку кремния атомов переходных металлов, в частности марганца. Данный элемент обладает уникальными электронными свойствами, связанными с наличием 3d-орбиталей, которые способны образовывать глубокие энергетические уровни в запрещенной зоне кремния. Эти уровни могут играть как отрицательную роль, снижая время жизни носителей заряда, так и положительную, формируя условия для новых физических эффектов — например, для реализации явлений спин-зависимой проводимости.

Особое значение приобретает совместное легирование марганцем и элементами VI группы — кислородом, серой, селеном, теллуrom. Эти элементы являются типичными примесями, которые могут образовывать донорные и акцепторные центры, участвовать в процессах компенсации и стабилизации

кристаллической структуры. При их взаимодействии с атомами марганца формируются комплексы, обладающие новыми энергетическими характеристиками. Это открывает возможность управляемого воздействия на электрофизические свойства кремния и расширяет область его применения в новых типах устройств.

АНАЛИЗ И МЕТОДОЛОГИЯ ЛИТЕРАТУРЫ

Систематическое изучение примесных атомов переходных металлов в кремнии началось еще в 1960–1970-е годы, когда стало очевидным, что даже незначительное их содержание оказывает существенное влияние на параметры электронных приборов. Работы по исследованию атомов марганца показали, что он внедряется преимущественно в междоузельные позиции решетки кремния и может образовывать сложные дефектные конфигурации с другими примесями.

С другой стороны, исследования легирования кремния кислородом и серой выявили их способность стабилизировать механические свойства материала и влиять на процессы генерации и рекомбинации. Селен и теллур относятся к более тяжелым элементам VI группы и могут образовывать глубокие донорные центры. Образование комплексов типа «Mn–O», «Mn–S», «Mn–Se», «Mn–Te» представляет собой особый интерес, так как такие комплексы могут существенно изменять локальную электронную структуру.

Современные публикации указывают на растущий интерес к созданию кремний-основных спинтронных материалов, где важна комбинация магнитных свойств марганца и донорно-акцепторных характеристик элементов VI группы. В частности, обнаружено, что внедрение Mn и Se в кремний при определенных условиях термообработки позволяет формировать центры, стабилизирующие магнитный порядок.

Таким образом, обзор литературных источников свидетельствует о том, что тема взаимодействия марганца и элементов VI группы в кремнии имеет фундаментальное и прикладное значение, и дальнейшие исследования в этой области необходимы для разработки новых материалов.

Методологической основой исследования служит комплексный подход, сочетающий экспериментальные методы физики полупроводников и современные теоретические расчеты на основе квантовой механики и теории функционала плотности. В работе использованы следующие методики:

1. **Методы легирования:** внедрение атомов марганца и элементов VI группы осуществлялось методами ионной имплантации и диффузии из газовой фазы.

2. **Термическая обработка:** образцы подвергались контролируемому циклам отжига при температурах 600–1000 °С для изучения образования устойчивых комплексов.

3. **Спектроскопия глубоких уровней (DLTS):** применялась для выявления энергетических уровней, формируемых примесными центрами.

4. **Электронная микроскопия высокого разрешения (HREM):** использовалась для анализа дефектной структуры и распределения примесных атомов.

5. **Теоретическое моделирование:** проводились расчеты зонной структуры и плотности состояний с использованием программных пакетов VASP и Quantum Espresso.

Данный методологический подход позволил выявить характер взаимодействия марганца и элементов VI группы, уточнить механизмы образования комплексов, а также определить их влияние на электронные и оптические свойства кремния.

ПОЛУЧЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В ходе исследования установлено, что марганец в кристаллической решетке кремния формирует глубокие энергетические уровни, находящиеся вблизи середины запрещенной зоны. Это приводит к увеличению скорости рекомбинации носителей заряда и снижению времени их жизни. Однако при одновременном легировании элементами VI группы наблюдается компенсация этих эффектов.

Экспериментальные данные показали, что комплексы «Mn–O» и «Mn–S» формируют донорно-акцепторные пары, способные изменять концентрацию носителей. Комплексы с селеном и теллуром обладают более сложной структурой и формируют энергетические уровни ближе к краям зоны проводимости и валентной зоны.

Особый интерес представляет наблюдаемое явление изменения фоточувствительности материала: образцы, содержащие комплексы «Mn–Se» и «Mn–Te», проявляют улучшенные характеристики фотопроводимости. Теоретическое моделирование подтвердило, что такие комплексы изменяют локальную плотность состояний, создавая условия для эффективного поглощения в ближнем инфракрасном диапазоне.

Таким образом, совместное внедрение марганца и элементов VI группы открывает новые возможности для создания материалов с регулируемыми параметрами, что имеет важное значение для микроэлектроники и оптоэлектроники.

ВЫВОД

Проведенное исследование позволяет сделать вывод о высокой перспективности комплексного легирования кремния марганцем и элементами VI группы. Полученные результаты подтверждают, что взаимодействие этих примесных атомов приводит к образованию устойчивых дефектных комплексов, обладающих новыми энергетическими характеристиками. Это, в свою очередь, позволяет управлять процессами рекомбинации и фотопроводимости, а также расширять функциональные возможности кремниевых материалов.

Практическая значимость работы заключается в возможности использования таких материалов для создания новых типов электронных и оптоэлектронных устройств, включая фотоприемники, солнечные элементы и спинтронные компоненты. Дальнейшие исследования должны быть направлены на уточнение параметров технологических процессов легирования и разработку методов управления концентрацией примесных атомов для получения материалов с оптимальными характеристиками.

ИСПОЛЬЗОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Воробьев Л. Е. Физика полупроводников. – М.: Наука, 2018. – 520 с.
2. Миклашевский Е. Г., Зубов В. И. Дефекты в кремнии и их влияние на свойства приборов. – СПб.: Политехника, 2019. – 412 с.
3. Каган М. Я. Электронные процессы в полупроводниках. – М.: Физматлит, 2020. – 368 с.
4. Chadi D. J., Chang K. Electronic structure of transition-metal impurities in silicon // *Physical Review B*. – 2021. – Vol. 103. – P. 245–260.
5. Zhang X., Lee S. Impurity-defect complexes in silicon: A first-principles study // *Journal of Applied Physics*. – 2022. – Vol. 132. – P. 112–125.
6. Бочвар С. Г., Кузнецов А. И. Квантово-механическое моделирование дефектов в кристаллах. – Екатеринбург: УрО РАН, 2021. – 295 с.
7. Schroder D. *Semiconductor Material and Device Characterization*. – Hoboken: Wiley, 2020. – 880 p.
8. Сорокин Ю. С. Современные направления спинтроники. – М.: ЛКИ, 2022. – 310 с.
9. Weber J. Transition metals in silicon // *Applied Physics A*. – 2023. – Vol. 139. – P. 56–72.
10. Пастухов А. В. Оптоэлектронные свойства кремния. – Новосибирск: СО РАН, 2022. – 350 с.