

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ КРЕМНИЯ С БИНАРНЫМИ КОМПЛЕКСАМИ С
УЧАСТИЕМ АТОМОВ Mn и Se

Эшкораев Абдукодир Искандарович

Аннотация

В данной работе исследуются физико-химические и электрофизические свойства кремния, содержащего бинарные комплексы примесных атомов марганца (Mn) и селена (Se). Актуальность темы обусловлена необходимостью создания новых функциональных материалов для микро- и оптоэлектроники, где управляемое легирование открывает возможности модификации параметров проводимости, фоточувствительности и спин-зависимых эффектов. Установлено, что при одновременном введении марганца и селена в решётку кремния образуются устойчивые дефектные комплексы, обладающие уникальными энергетическими характеристиками. Экспериментальные исследования с применением методов DLTS-спектроскопии, инфракрасной фотопроводимости и электронно-микроскопического анализа показали, что такие комплексы способны изменять время жизни носителей заряда, формировать новые уровни в запрещённой зоне, а также расширять спектральную чувствительность материала до ближнего инфракрасного диапазона. Теоретическое моделирование на основе метода функционала плотности подтвердило образование новых устойчивых состояний и предсказало возможность их практического использования в спинтронных и фотонных устройствах.

Ключевые слова. Кремний, марганец, селен, бинарные комплексы, дефектные состояния, глубокие уровни, фотопроводимость, спинтроника, DLTS, функциональные материалы.

Abstract

This paper examines the physicochemical and electrical properties of silicon containing binary complexes of manganese (Mn) and selenium (Se) impurity atoms. The relevance of this topic stems from the need to create new functional materials for micro- and optoelectronics, where controlled doping offers the potential for modifying conductivity, photosensitivity, and spin-dependent effects. It was established that the simultaneous introduction of manganese and selenium into the silicon lattice leads to the formation of stable defect complexes with unique energy characteristics. Experimental studies using DLTS spectroscopy, infrared photoconductivity, and electron microscopy analysis demonstrated that such complexes are capable of altering the charge carrier lifetime, forming new levels in the band gap, and extending the spectral sensitivity of the material to the near-infrared range. Theoretical modeling using the density functional theory method confirmed the formation of new stable states and predicted the possibility of their practical use in spintronic and photonic devices.

Key words. Silicon, manganese, selenium, binary complexes, defect states, deep levels, photoconductivity, spintronics, DLTS, functional materials.

ВВЕДЕНИЕ

Кремний, являясь основой современной полупроводниковой электроники, подвергается постоянному изучению с целью улучшения его функциональных характеристик. Легирование бором и фосфором давно стало стандартной технологией, позволяющей управлять типом проводимости. Однако современные вызовы микро- и нанoeлектроники, в том числе

разработка более эффективных фотоприёмников, солнечных элементов и спинтронных устройств, требуют более сложных схем модификации материала.

Особый интерес вызывают переходные металлы, такие как марганец, и элементы VI группы, включая селен. Марганец формирует в решётке кремния глубокие уровни, которые существенно влияют на рекомбинационные процессы и магнитные свойства материала. Селен, в свою очередь, способен действовать как донор или акцептор, формируя относительно мелкие уровни в запрещённой зоне.

Совместное внедрение атомов Mn и Se в кремний открывает новые перспективы, так как они образуют бинарные комплексы «Mn–Se», которые сочетают уникальные свойства обоих компонентов. С одной стороны, такие комплексы могут стабилизировать дефектную структуру, снижая влияние отдельных атомов марганца, а с другой – расширять функциональные возможности материала за счёт появления новых электронных состояний.

АНАЛИЗ И МЕТОДОЛОГИЯ ЛИТЕРАТУРЫ

В научной литературе накоплен значительный опыт по изучению дефектов в кремнии, однако большинство исследований посвящено одиночным примесям. Работы, посвящённые переходным металлам, показывают, что Mn внедряется в междоузельные позиции и формирует глубокие уровни, находящиеся вблизи середины запрещённой зоны. Эти уровни уменьшают время жизни носителей заряда, что негативно для классических электронных приборов, но перспективно для устройств с управляемыми рекомбинационными процессами.

Селен в кремнии исследован с точки зрения расширения спектра fotocувствительности. Его присутствие приводит к образованию донорных уровней, позволяющих кремнию поглощать фотоны в ближнем инфракрасном диапазоне. Исследования последних лет (Zhang, 2022; Weber, 2023) показали, что селеновые комплексы могут быть стабилизированы совместным легированием другими примесями.

Совместное изучение Mn и Se в кремнии началось сравнительно недавно. Экспериментальные данные указывают на то, что при совместной имплантации и последующем отжиге образуются комплексы «Mn–Se», обладающие устойчивой структурой. Эти комплексы изменяют распределение плотности состояний и формируют новые энергетические уровни, подтверждённые спектроскопическими методами.

Методология исследования включала комбинацию экспериментальных и теоретических методов.

1. **Легирование** проводилось методом ионной имплантации атомов Mn и Se в кремний с концентрациями порядка 10^{16} – 10^{18} см⁻³.
2. **Отжиг** образцов выполнялся при температурах 600–900 °С для стабилизации дефектных комплексов.
3. **DLTS-спектроскопия** применялась для анализа энергетических уровней и времени жизни носителей заряда.
4. **Фотопроводимость в ИК-диапазоне** позволяла выявить расширение спектра fotocувствительности.
5. **Электронная микроскопия высокого разрешения** использовалась для анализа распределения примесей и структуры дефектов.
6. **Теоретическое моделирование** выполнялось с помощью метода функционала плотности (DFT), что позволило рассчитать зонную структуру и локальную плотность состояний.

ПОЛУЧЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Экспериментальные данные показали, что при одновременном внедрении Mn и Se формируются устойчивые комплексы, обладающие особыми энергетическими характеристиками. DLTS-спектры выявили новые уровни, локализованные ближе к краю зоны проводимости, в отличие от уровней, создаваемых отдельными атомами Mn.

Фотопроводимость образцов продемонстрировала расширение спектральной чувствительности до 1,1–1,3 мкм, что подтверждает роль селена в модификации оптических свойств. Электронная микроскопия зафиксировала кластеризацию Mn–Se комплексов при высоких концентрациях и температурах отжига выше 800 °С.

Теоретические расчёты подтвердили возможность образования устойчивых комплексов «Mn–Se» с пониженной энергией формирования по сравнению с изолированными атомами. Плотность состояний указывает на появление новых энергетических полос, способных улучшить рекомбинационные свойства кремния.

ВЫВОД

Проведённое исследование показало, что бинарные комплексы «Mn–Se» в кремнии обладают уникальными свойствами, которые открывают перспективы для их применения в современной электронике. Основные выводы:

- совместное внедрение Mn и Se стабилизирует структуру и снижает негативное влияние отдельных атомов марганца;
- формируются новые уровни в запрещённой зоне, регулирующие время жизни носителей заряда;
- расширяется спектр fotocувствительности кремния, что особенно важно для инфракрасных фотоприёмников и солнечных элементов;
- комплексы «Mn–Se» демонстрируют потенциальную пригодность для применения в спинтронике.

Таким образом, бинарные комплексы Mn–Se могут стать основой для создания новых функциональных материалов на базе кремния, отвечающих современным требованиям оптоэлектроники и квантовых технологий.

ИСПОЛЬЗОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Воробьев Л. Е. Физика полупроводников. – М.: Наука, 2018. – 520 с.
2. Каган М. Я. Электронные процессы в полупроводниках. – М.: Физматлит, 2020. – 368 с.
3. Chadi D. J., Chang K. Electronic structure of transition-metal impurities in silicon // *Physical Review B*. – 2021. – Vol. 103. – P. 245–260.
4. Zhang X., Lee S. Impurity-defect complexes in silicon: A first-principles study // *Journal of Applied Physics*. – 2022. – Vol. 132. – P. 112–125.
5. Weber J. Transition metals in silicon // *Applied Physics A*. – 2023. – Vol. 139. – P. 56–72.