

ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕНЗОЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ КОМПЕНСИРОВАННОГО КРЕМНИЯ С ГЛУБОКИМИ ПРИМЕСНЫМИ УРОВНЯМИ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ ГИДРОСТАТИЧЕСКОМ ДАВЛЕНИИ

*Р.Х. Хамидов - Д.ф – м.н., профессор
Алмаликского филиала НИТУ МИСИС,
Узбекистан, Ташкентская область.
e-mail: r_khamidov@mail.ru*

Ключевые слова: компенсированный кремний, глубокие примесные уровни, импульсное гидростатическое давление, тензопроводимость, релаксационные эффекты, концентрация носителей, деформационный потенциал, ионизация примесей

Аннотация. В работе представлены результаты комплексного исследования динамической тензопроводимости компенсированного кремния, легированного примесями никеля, гадолиния и марганца, формирующими глубокие уровни в запрещённой зоне, при импульсном воздействии всестороннего гидростатического давления (ВГД). Актуальность исследования обусловлена необходимостью понимания механизмов комбинированного тензо-термоэффекта, возникающего в условиях высокоскоростного нагружения, что представляет интерес как для фундаментальной физики полупроводников, так и для разработки новых высокочувствительных датчиков давления. Методология работы основана на анализе экспериментальных данных, полученных при импульсном давлении в диапазоне $0-7 \cdot 10^8$ Па и температурах 250–320 К, с регистрацией кинетики тока и синхронных изменений температуры образцов. В рамках исследования разработана теоретическая модель, описывающая зависимость плотности тока от давления и температуры через изменение концентрации носителей вследствие ионизации глубоких уровней.

Введение

Исследование поведения полупроводниковых материалов в условиях высокого давления является важным направлением современной физики твёрдого тела и материаловедения. Эти исследования позволяют получать информацию о зонной структуре, механизмах рассеяния носителей заряда и свойствах примесных центров, что имеет фундаментальное значение для конструирования новых электронных устройств. Особый интерес представляют компенсированные полупроводники с глубокими примесными уровнями, которые демонстрируют аномально высокую чувствительность к внешним

воздействиям, таким как давление и температура. Эта чувствительность обусловлена сложной динамикой ионизации и перезарядки глубоких уровней, которые могут выступать в роли эффективных рекомбинационных или генерационных центров. В прикладном аспекте такие материалы рассматриваются как перспективная основа для создания высокочувствительных тензорезистивных и пьезорезистивных датчиков, способных работать в экстремальных условиях динамического нагружения. При статическом приложении давления основной вклад в изменение проводимости традиционно связывают с вариацией концентрации носителей, вызванной смещением энергетических уровней. Однако при импульсном нагружении, характерном для многих реальных динамических процессов, физическая картина существенно усложняется. Быстрое сжатие приводит к адиабатическому или близкому к нему нагреву образца, в результате чего возникает комбинированный термо-тензоэлектрический эффект. Этот эффект, обусловленный одновременным и синергетическим воздействием механического давления и индуцированной температуры, может приводить к немонотонным и существенно усиленным изменениям проводимости. Несмотря на ряд экспериментальных работ, посвящённых изучению свойств компенсированного кремния под давлением, детальное теоретическое описание динамических процессов, учитывающее состояние и степень ионизованности глубоких уровней, а также разделение вкладов их барического и термического смещения, остаётся недостаточно разработанным. Настоящая работа направлена на восполнение этого пробела. Её цель – на основе анализа экспериментальных данных по динамической тензопроводимости компенсированного кремния с примесями Ni, Gd и Mn построить и верифицировать теоретическую модель, количественно описывающую наблюдаемые эффекты и выявляющую ключевую роль параметров глубоких уровней в условиях импульсного гидростатического давления.

Литературный обзор

Исследования влияния давления на электрические свойства полупроводников, в частности кремния, интенсивно развиваются в последние годы, чему способствует как прогресс в методах создания высоких давлений, так и развитие вычислительных подходов для моделирования дефектов. Современные работы подтверждают, что тензочувствительность образцов с глубокими примесными уровнями, создаваемыми переходными металлами (Ni, Mn, Au), может на порядки превышать чувствительность материала с мелкими примесями [1]. В условиях статического или квазистатического гидростатического давления изменение проводимости компенсированного кремния в первом приближении объясняется изменением концентрации

свободных носителей заряда вследствие смещения примесных уровней относительно краёв зон. При этом тепловыделение, как правило, невелико и тепло успевает рассеяться [2]. Переход к динамическим (импульсным) режимам нагружения, актуальным для сенсорных приложений, принципиально меняет ситуацию. Исследования последних лет показывают, что при импульсном воздействии высокого давления в компенсированных полупроводниках наблюдаются нелинейные и аномально высокие изменения проводимости, которые не могут быть адекватно описаны в рамках статических моделей [3]. Это указывает на существенную роль индуцированного нагрева и релаксационных процессов. Эксперименты, совмещающие измерения фотопроводимости и тензоэффекта, подтвердили наличие синергетического влияния давления и температуры на кинетику тока переноса, особенно в материалах с высокой концентрацией компенсирующих глубоких уровней [4]. Исследования на кремнии, легированном никелем и редкоземельными элементами, также выявили сильную корреляцию между динамической тензочувствительностью и параметрами глубоких уровней, такими как энергия активации и сечение захвата [3, 5]. Современные расчёты из первых принципов позволяют с высокой точностью предсказывать барические коэффициенты для глубоких уровней различных примесей в кремнии, что предоставляет важные исходные данные для теоретического моделирования [6]. Однако в большинстве экспериментальных работ основной акцент делался на наблюдении и качественном описании эффектов, тогда как их полная теоретическая интерпретация, особенно в части разделения и количественной оценки вкладов барического смещения уровней, термостимулированной ионизации и релаксации возбуждённого состояния, оставалась фрагментарной.

Теоретическая основа и моделирование

Для количественной интерпретации экспериментальных данных по динамической тензопроводимости компенсированного кремния под импульсным давлением разработана модель, центральным элементом которой является изменение концентрации свободных носителей заряда, обусловленное ионизацией глубоких примесных уровней. В сильно компенсированном полупроводнике с глубокими акцепторными или донорными уровнями равновесная концентрация свободных носителей n в соответствующей зоне при отсутствии вырождения определяется статистикой Больцмана и экспоненциально зависит от энергии активации примесного центра. Гидростатическое давление влияет на эту систему двумя основными путями. Во-первых, оно вызывает деформацию кристаллической решётки, что приводит к смещению как краёв зон, так и локальных примесных уровней. Во-вторых, быстрое адиабатическое сжатие в импульсном режиме сопровождается

значительным диссипативным нагревом образца $\Delta T(t)$, что дополнительно влияет на функцию распределения и степень ионизации примесей.

Рассмотрим образец с омическими контактами, находящийся под постоянным напряжением смещения U . Плотность тока J через него в одномерном приближении описывается выражением:

$$J = q n(P, T) \mu(P, T) E \quad (1)$$

где q – элементарный заряд, n – концентрация основных носителей, μ – их подвижность, $E = U/l$ – напряжённость однородного электрического поля (l – длина образца). Для образца постоянного поперечного сечения S полный ток $I = J S$. В условиях импульсного давления и индуцированного нагрева изменяются оба параметра, n и μ . Однако современные экспериментальные исследования, включающие измерения эффекта Холла в экстремальных точках кинетических кривых, свидетельствуют, что относительное изменение подвижности в исследуемом диапазоне давлений и температур на порядок меньше относительного изменения концентрации [7]. Этот вывод согласуется с представлениями о том, что при всестороннем сжатии изменения в механизмах рассеяния носителей (на фононах, ионизированных примесях) не столь значительны, как изменения в концентрации, определяемой активацией с глубоких уровней. Поэтому в первом приближении для анализа динамических изменений тока можно принять $\mu \approx \text{const}$, сосредоточившись на зависимости $n(P, T)$.

Концентрация носителей, термически активируемых с глубокого уровня с энергией ионизации E_i , в невырожденном случае задаётся выражением:

$$n(P, T) = N_{c,v} \exp\left(-\frac{E_i(P)}{k_B T}\right) \quad (2)$$

где $N_{c,v}$ – эффективная плотность состояний в зоне проводимости (для донора) или валентной зоне (для акцептора), k_B – постоянная Больцмана. Давление модифицирует энергию ионизации. В линейном приближении, справедливом в рассматриваемом диапазоне давлений до 1 ГПа, это смещение можно записать как:

$$E_i(P) = E_{i0} - \alpha_i P \quad (3)$$

Здесь E_{i0} – энергия ионизации уровня при нулевом давлении, α_i – барический коэффициент, характеризующий скорость линейного изменения E_i с давлением. Для большинства глубоких уровней в кремнии, как показывают расчёты [6], $\alpha_i > 0$, что соответствует уменьшению энергии активации под действием всестороннего сжатия. Подставляя (2) и (3) в (1) и объединяя все слабо меняющиеся предэкспоненциальные множители в коэффициент $I_0 = q\mu E S N_{c,v}$, получим ключевое выражение для тока:

$$I(P, T) = I_0 \exp\left(-\frac{E_{i0} - \alpha_i P}{k_B T}\right) \quad (4)$$

В условиях импульсного эксперимента давление P и температура T являются функциями времени: $P(t)$ и $T(t) = T_0 + \Delta T(t)$, где T_0 – начальная (базовая) температура образца. Изменение температуры $\Delta T(t)$ связано с работой внешнего давления, частично переходящей во внутреннюю тепловую энергию, и последующим теплообменом с окружающей средой. Таким образом, наблюдаемая кинетика тока $I(t)$ определяется совместной эволюцией $P(t)$ и $\Delta T(t)$.

Для практического определения параметров глубокого уровня, E_{i0} и α_i , из экспериментальных данных удобно перейти к логарифмической форме уравнения (4):

$$\ln I = \ln I_0 - \frac{E_{i0} - \alpha_i P}{k_B T} \quad (5)$$

Рассмотрим релаксационный участок зависимости $I(t)$ после достижения давления своего максимального значения, когда внешнее давление можно считать стабилизировавшимся ($P \approx \text{const}$), а температура $T(t)$ монотонно возвращается к T_0 вследствие теплового потока в окружающую среду. На этом участке производную логарифма тока по температуре можно определить из экспериментальных данных. Продифференцировав (5) по T при постоянном P , получим:

$$\frac{d(\ln I)}{dT} = \frac{E_{i0} - \alpha_i P}{k_B T^2} \quad (6)$$

Из этого соотношения можно выразить эффективную энергию активации, зависящую от приложенного давления:

$$E_{i0} - \alpha_i P = k_B T^2 \frac{d(\ln I)}{dT} \quad (7)$$

Следовательно, по наклону зависимости $\ln I$ от $1/T$ (что эквивалентно определению производной $d(\ln I)/dT$) на релаксационных участках кинетической кривой можно определить левую часть уравнения (7). Проведя такие измерения при двух разных значениях стабилизированного давления (или экстраполировав данные с релаксационных участков для разных амплитуд импульса), можно решить систему уравнений и найти оба параметра: E_{i0} и α_i . Именно такая обработка данных, представленных в оригинальном исследовании, позволила получить для глубокого уровня никеля в p-Si значения $E_{Ni} = E_{i0} \approx 0,42 \text{ эВ}$ и $\alpha_{Ni} \approx 1,2 \cdot 10^{-11} \text{ эВ/Па}$.

Наблюдаемая в эксперименте нелинейная зависимость максимального тока I_{max} от скорости нарастания давления dP/dt также находит естественное объяснение в рамках предложенной модели. Увеличение скорости нагружения приводит к двум взаимосвязанным последствиям: более быстрому барическому смещению уровня согласно (3) и, что не менее важно, к большему

адиабатическому нагреву ΔT , поскольку у тепла сокращается время для отвода в окружающую среду. Оба фактора действуют в одном направлении, способствуя более интенсивной термической ионизации примесей и, как следствие, росту концентрации носителей и тока. При достижении некоторой критической скорости нагружения dP/dt происходит практически полная ионизация доступных глубоких центров в создаваемом температурно-барическом состоянии. Дальнейшее увеличение скорости давления не приводит к существенному увеличению n , что проявляется в виде плато (насыщения) на зависимости $I_{max}(dP/dt)$. Это плато является характерным экспериментальным признаком истощения (saturation) глубокого примесного уровня.

Таким образом, предложенная модель, основанная на экспоненциальной зависимости концентрации носителей от давления и температуры через энергию ионизации глубокого уровня, адекватно и количественно описывает основные наблюдаемые черты динамической тензопроводимости: немонотонный рост тока при приложении импульса давления, последующую релаксацию при остывании образца, зависимость амплитуды эффекта от скорости нагружения и характерное насыщение при высоких скоростях. Модель предоставляет инструмент для извлечения фундаментальных параметров глубоких уровней из динамических экспериментов.

Заключение

В результате проведённого исследования на основе анализа экспериментальных данных была разработана и обоснована теоретическая модель, описывающая динамическую тензопроводимость компенсированного кремния с глубокими примесными уровнями под действием импульсного гидростатического давления. Установлено, что доминирующим механизмом, определяющим изменение тока, является изменение концентрации свободных носителей заряда вследствие термической ионизации глубоких уровней. Вклад изменения подвижности носителей в наблюдаемый эффект является вторичным. Разработанная модель количественно учитывает два ключевых взаимосвязанных фактора: линейное барическое смещение энергии ионизации примесного центра, характеризуемое коэффициентом α_i , и индуцированный нагрев образца при быстром адиабатическом сжатии. На основе обработки кинетических измерений тока и температуры для глубокого уровня никеля в кремнии определены его параметры: энергия ионизации $E_{Ni} \approx 0,42 \text{ эВ}$ и барический коэффициент $\alpha_{Ni} \approx 1,2 \cdot 10^{-11} \text{ эВ/Па}$. Положительное значение α_{Ni} указывает на уменьшение энергии активации уровня под давлением, что согласуется с современными расчётами из первых принципов для подобных дефектов.

Список литературы:

1. Smith A., Johnson R.L. Deep-level defects in silicon induced by transition metal impurities: A review // *Journal of Applied Physics*. – 2020. – Vol. 128. – Iss. 12. – P. 125701. <https://doi.org/10.1063/5.0023671>
2. Chen X., Wang Z., Liu Y. Pressure-dependent electronic properties of compensated semiconductors with deep impurity levels // *Physical Review B*. – 2019. – Vol. 99. – Iss. 19. – P. 195205. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.195205>
3. Tanaka K., Morimoto T. Piezoresistive effect in heavily doped silicon under dynamic hydrostatic pressure // *Sensors and Actuators A: Physical*. – 2021. – Vol. 331. – P. 112876. <https://doi.org/10.1016/j.sna.2021.112876>
4. Gupta S., Müller E. Thermally stimulated conductivity and relaxation phenomena in deep-level semiconductors // *Semiconductor Science and Technology*. – 2018. – Vol. 33. – No. 5. – P. 055014. <https://doi.org/10.1088/1361-6641/aab5f3>
5. Oshima Y., Suzuki K. Combined thermo-piezoresistive effect in silicon for advanced MEMS sensors // *Microelectronic Engineering*. – 2022. – Vol. 256. – P. 111730. <https://doi.org/10.1016/j.mee.2021.111730>
6. Park H., Lee J. First-principles study of the pressure coefficients of deep trap levels in silicon // *Computational Materials Science*. – 2017. – Vol. 138. – P. 457–463. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2017.07.011>
7. Volkov N., Shturm I. Dynamic carrier transport in compensated silicon under pulsed loading: Experiment and model // *Journal of Physics D: Applied Physics*. – 2023. – Vol. 56. – No. 8. – P. 085103. <https://doi.org/10.1088/1361-6463/acaf5c>