

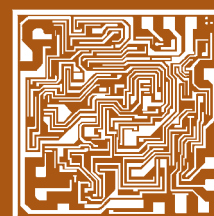
ISSN 0544-1269

Том 53, Номер 2

Март–Апрель 2024



МИКРОЭЛЕКТРОНИКА



НАУКА

— 1727 —

СОДЕРЖАНИЕ

Том 53, номер 2, 2024

ДИАГНОСТИКА

Структурные особенности и электрические свойства термомиграционных каналов Si(Al) для высоковольтных фотоэлектрических преобразователей <i>А. А. Ломов, Б. М. Середин, С. Ю. Мартюшов, А. А. Татаринцев, В. П. Попов, А. В. Малибашев</i>	119
--	-----

МОДЕЛИРОВАНИЕ

Моделирование диффузии атомов в многокомпонентных полупроводниках в неупорядоченном состоянии <i>С. М. Асадов</i>	132
Применение метода конечных элементов для расчета параметров поверхностных акустических волн и устройств на их основе <i>А. С. Койгеров</i>	142
Новый подход к моделированию радиационных эффектов низкой интенсивности в биполярных микросхемах <i>А. И. Чумаков</i>	156

ТЕХНОЛОГИИ

Пульсации DC/DC преобразователя, построенного по SEPIC топологии <i>В. К. Битюков, А. И. Лавренов</i>	162
Влияние примеси никеля на эксплуатационные параметры кремниевого солнечного элемента <i>З. Т. Кенжаев, Н. Ф. Зикриллаев, В. Б. Оджаев, К. А. Исмаилов, В. С. Просолович, Х. Ф. Зикриллаев, С. В. Ковешников</i>	169
Временные изменения механизмов токопрохождения в легированном эрбием пористом кремнии <i>Э. Х. Хамзин, Д. А. Услин</i>	179

CONTENTS

No 2, 2024

DIAGNOSTICS

Structural features and electrical properties of Si(Al) thermal migration channels for high-voltage photovoltaic converters

*A. A. Lomov, B. M. Seredin, S. Yu. Martyushov,
A. A. Tatarintsev, V. P. Popov, A. V. Malibashev*

119

MODELING

Modeling the diffusion of atoms in multicomponent semiconductors in a disordered state

S. M. Asadov

132

Application of the finite element method for calculating the surface acoustic wave parameters and devices

A. S. Koigerov

142

The new approach of a simulation low dose rate radiation effects in bipolar integrated circuits

A. I. Chumakov

156

TECHNOLOGIES

Ripple of a DC/DC converter based on SEPIC topology

V. K. Bitukov, A. I. Lavrenov

162

Influence of nickel impurities on the operational parameters of a silicon solar cell

*Z. T. Kenzhaev, N. F. Zikrillaev, V. B. Odzhaev, K. A. Ismailov,
V. S. Prosolovich, Kh. F. Zikrillaev, S. V. Koveshnikov*

169

Temporary changes in current flow mechanisms in erbium-doped porous silicon

E. Kh. Khamzin, D. A. Uslin

179

СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТЕРМОМИГРАЦИОННЫХ КАНАЛОВ Si(Al) ДЛЯ ВЫСОКОВОЛЬТНЫХ ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ

© 2024 г. А. А. Ломов¹*, Б. М. Середин², С. Ю. Мартюшов³,
А. А. Татаринцев¹, В. П. Попов², А. В. Малибашев²

¹Физико-технологический институт им. К.А. Валиева Российской академии наук,
Москва, Россия

²Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) им. М.И. Платова,
Новочеркасск, Россия

³Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов,
Троицк, Россия

*E-mail: lomov@ftian.ru

Поступила в редакцию 16.12.2023 г.

После доработки 01.02.2024 г.

Принята к публикации 05.02.2024 г.

Представлены результаты исследования структурных особенностей и электрических свойств сквозных термомиграционных p -каналов Si(Al) в пластине кремния. Структурные исследования выполнены рентгеновскими методами проекционной топографии, кривых дифракционного отражения и растровой электронной микроскопии. Показано, что интерфейс канал — матрица является когерентным без образования дислокаций несоответствия. Показана возможность применения массива термомиграционных p -каналов из 15 элементов для формирования монолитного фотоэлектрического солнечного модуля в кремниевой пластине Si(111) на основе p -каналов шириной 100 мкм со стенками в плоскости $(1\bar{1}0)$. Монолитный солнечный модуль обладает эффективностью преобразования 13.1%, напряжением холостого хода 8.5 В и плотностью тока короткого замыкания 33 мА/см².

Ключевые слова: термомиграция, p – n -переход, кремний, алюминий, рентгеновская топография, дифракция, кривая качания, U – I – R -свойства, высоковольтный солнечный модуль

DOI: 10.31857/S0544126924020018

1. ВВЕДЕНИЕ

Одним из основных направлений в микро- и наноэлектронике является уменьшение размеров элементной базы вплоть до нескольких нанометров. В то же время для генерирования большей мощности современные фотопреобразователи, создаваемые на основе традиционных полупроводников солнечных элементов [1, 2] или с применением новых неорганических [3] и органических материалов [4], имеют сравнительно гигантские размеры. Проблема заключается в физических свойствах используемых материалов, ограничивающих работоспособность фотопреобразователя как для генерации тока, так и выходного напряжения. В основе любого фотоэлектрического элемента лежит плоская структура, состоящая из p – n -перехода, позволяющая получить выходное напряжение $U \sim 1$ В. В последние годы активно разрабатываются каскадные структуры, в которых формируются несколько

переходов с разной шириной запрещенной зоны для поглощения всей видимой области солнечного спектра. Эффективность каскадных структур достигает 39.5% и позволяет получить на одном элементе напряжение $U \sim 3$ В [5]. Обычно для увеличения U фотоэлектрические элементы собирают в батареи, внедряя в их конструкцию дополнительные межэлементные и коммутационные цепи, которые приводят к увеличению размеров изделия. Альтернативный подход, снимающий проблему коммутационных цепей, основан на формировании в пластине монокристаллического кремния массива сквозных вертикальных легированных областей — p -каналов. Кроме диффузионного процесса, традиционно используемого для локального легирования полупроводниковых подложек, массивы p -каналов могут быть получены [6] на основе явления термомиграции (ThM) [7, 8], которое для полупроводниковых кристаллов изучалось в работах [7–12]. Процесс ThM примеси выгодно отличается от

диффузии небольшой продолжительностью (менее 1 ч) [6–10], возможностью управления формой канала [12, 13], однородностью области легирования и наличием резких границ сквозных вертикальных p – n -переходов [8, 12]. В работах [6, 13, 14] предложено использовать вертикальные p – n -переходы для формирования монолитной кремниевой солнечной батареи (далее модуль MSCM – monolithic solar cells module. Не путать с CТМ – cell-to-module [3]). Исследования электрических, фотовольтаических и структурных свойств p – n -переходов представлены в [6, 13, 14] соответственно. Применение метода ThM для получения различных полупроводниковых структур приведены в [6, 15].

Массивы сквозных линейных каналов p -типа шириной 10–100 мкм в матричных полупроводниковых пластинах являются основой для компактных высоковольтных монолитных горизонтальных солнечных модулей. Отметим, что введение легирующей примеси в канал вызывает в нем механические напряжения. Механические напряжения в области формируемого канала оказывают воздействие на процесс его кристаллизации во время формирования. В результате это может привести к искажению формы канала и расположения его в кристаллической пластине. Такие структурные искажения канала в латеральном (по сечению) и нормальном (по глубине) к поверхности пластины направлениях приведут к изменению свойств не только отдельного p – n -перехода, но и окажут влияние на соседствующие с ним. Известно [16], что локальные механические напряжения влияют на ширину запрещенной зоны и изменяют электрические свойства формируемого p – n -перехода и солнечной батареи [17]. Последнее обстоятельство чрезвычайно важно при формировании массива узких периодических каналов с маленькой «скважностью». Их величина и однородность будет зависеть как от ширины канала, так и от межканального расстояния. Это требует получения узких однородных каналов с незначительными механическими напряжениями. Для этого необходим контроль за влиянием полей деформации в канале и вблизи его границ на электрические свойства формируемых p – n -переходов.

Формирование кремниевого p -канала методом ThM алюминия проводится при квазистационарных условиях в вакуумной камере в диапазоне температур 1100–1450 К при градиенте температур 50–100 К/см. Подчеркнем, что скорость движения жидкой зоны [6, 8, 9], а значит, и скорость перекристаллизации областей кремния с примесями атомами алюминия зависят от температуры. Это должно привести по аналогии с трансформацией габитуса растущей булы кремния [16] к зависимости рельефа границы матрица – канал от температуры. В процессе отжига полученной пластины с каналами в ней возможно образование

структурных дефектов: в объеме p -канала, на границе p – n -перехода и вблизи выхода канала на поверхность пластины. Состав, строение и структурное совершенство термомиграционных областей в приповерхностных слоях пластины и сквозных каналов p -типа были ранее изучены [8, 14]. Однако детальных исследований структурных особенностей массивов p -каналов и их влияния на электрофизические и фотовольтаические свойства как единичного p – n -перехода, так и на высоковольтный монолитный модуль в литературе не представлено. В связи с этим возникает задача контроля структурного совершенства каналов и влияния искажений кристаллической решетки на электрофизические свойства p – n -переходов.

При термомиграции и последующих технологических процессах в p -канале, на межфазных границах и внутри матрицы пластины кремния происходят искажения кристаллической решетки и образование различных структурных дефектов (дислокации, преципитаты Al_2O_3 и т.д.). Для исследования реальной структуры широкое применение получили дифракционные рентгеновские методы: проекционная топография, кривые дифракционного отражения (геометрия Брэгга) и кривые дифракционного прохождения (геометрия Лауэ). Особенность рентгеновских методов состоит в разрушающем воздействии, высокой ($\Delta d/d \sim 10^{-6}$) чувствительности к искажениям кристаллической решетки, возможности исследовать образцы толщиной в несколько сотен микрон и получать численные характеристики об объекте исследования. Ранее эти методики впервые были продемонстрированы при исследовании p -каналов [14, 18, 19]. Независимый контроль геометрических размеров каналов выполнялся методами металлографии и растровой электронной микроскопии [7, 12, 14, 15, 20].

Настоящая работа посвящена исследованию реальной структуры и электрофизических свойств термомиграционных кремниевых легированных алюминием p -каналов Si(Al) и фотовольтаических свойств монолитного солнечного модуля MSCM.

2. ЭКСПЕРИМЕНТ

Образцы

Сквозные вертикальные p -каналы Si(Al) были получены на монокристаллических пластинах Si(111) (P) n -типа (удельное сопротивление $\rho = 45 \text{ Ом} \times \text{см}$, диаметр – 76 мм, толщина – 400 мкм, плотность дислокаций – менее 10^2 см^{-2}). Для легирования каналов использовался 99.99% алюминий. С этой целью перед началом процесса ThM на фронтальной поверхности кремниевой пластины методом магнетронного напыления были нанесены массивы алюминиевых ламелей. Ламели имели длину 20 мм, ширину и толщину 100 и 10 мкм соответственно и наносились на подложку с интервалом 3 мм. Ламели на поверхности

пластины были ориентированы вдоль направления $\langle 211 \rangle$. Процесс ThM проводился в вакууме при температуре 1450 К при градиенте температуры 90 К/см. Перед проведением рентгенодифракционных исследований для устранения остатков материала от процесса ThM фронтальная и тыльная поверхности пластины подвергались полировке и последующему химическому травлению до остаточной толщины $h \sim 300$ мкм. Из пластины с каналами Si(Al) был вырезан образец в виде прямоугольника с размерами 25×45 мм. Каналы были параллельны меньшей стороне образца. Фрагмент схемы образца с каналами представлен на рис. 1, а, а на рис. 1, б показаны точки приложения контактов для измерения электрических характеристик отдельного канала.

Отличие условий формирования массива p -каналов для MSCM модуля с 15 ячейками состояло в двухстадийном ThM процессе. Решалась задача стабилизации движения зоны расплава Al(Si) и формирования всего массива неразрывных однородных p -каналов [21, 22]. Начало процесса, являясь

наиболее уязвимой стартовой точкой [23, 24] термомиграции, проходило при температуре 1350 К в течение 15 мин. Далее ThM процесс проводился при постоянной температуре 1450 К в течение 100 мин. После окончания ThM процесса пластина с массивом p -каналов проходила технологические стадии создания монолитного солнечного модуля (рис. 2).

Электронная микроскопия

Геометрия и состав p -каналов вблизи их выхода на поверхность пластины и на ее сколах были изучены методом растровой электронной микроскопии (SEM). Эксперименты выполнялись на сканирующем электронном микроскопе Carl Zeiss Ultra 55, оборудованном энергодисперсионным спектрометром (EDS) рентгеновского излучения Oxford Instrument INCA X-act.

Рентгеновская топография

Структурное совершенство и геометрия сквозных вертикальных p -каналов были проверены с использованием метода проекционной топографии

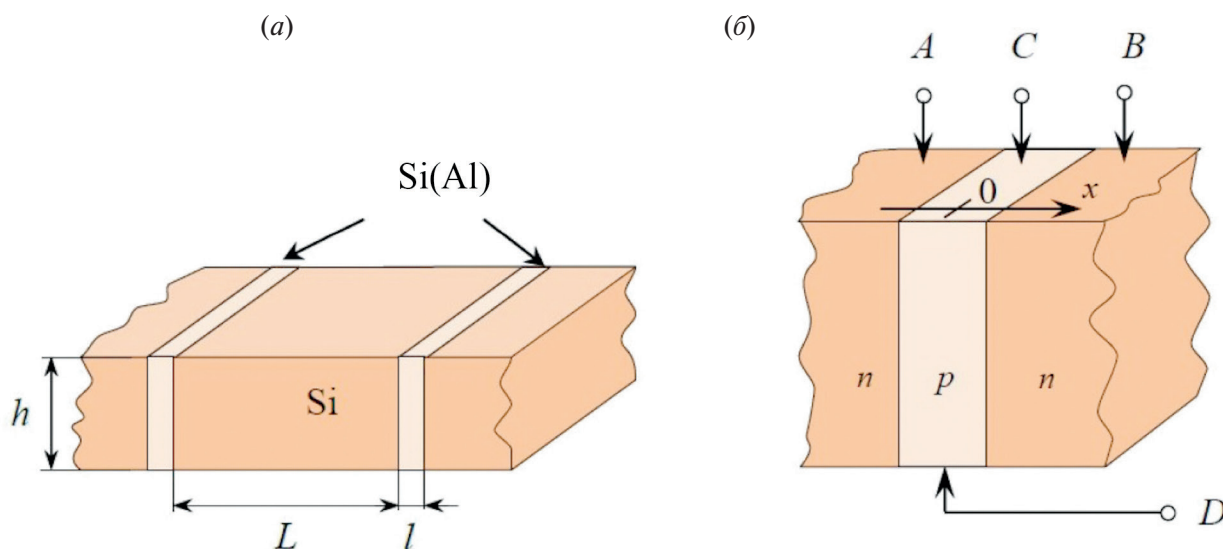


Рис. 1. Фрагмент схемы образца-пластины Si(111) с p -каналами Si(Al) (а) и места контактов для измерения электрических U – I – R -параметров p – n -перехода (б), где h – толщина пластины; L – расстояние между каналами; l – ширина канала; $x = 0$ – положение центра канала на поверхности пластины.

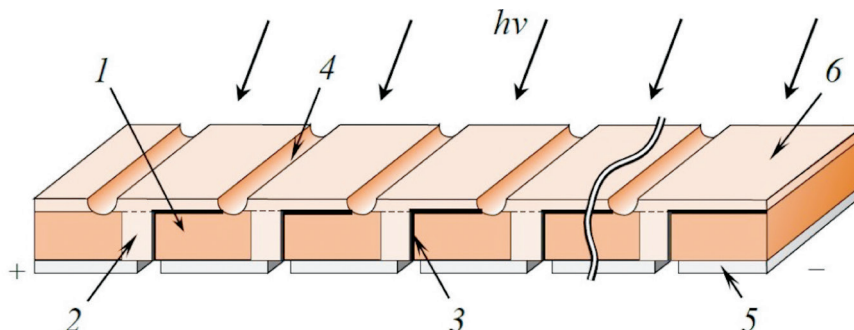


Рис. 2. Схема монолитного солнечного модуля из нескольких элементов: 1 – исходная кремниевая пластина; 2 – p -канал Si(Al) (ThM процесс); 3 – рабочий p – n -переход; 4 – разделительная канавка; 5 – шунт Ag; 6 – p -слой Si(B) (твердотельная глубокая диффузия).

на камере XRT100 CCM (Rigaku) с серебряным анодом ($\lambda = 0.056$ нм). Параметр съемки $\mu t = 0.36$, где $\mu = 8 \text{ см}^{-1}$ — линейный коэффициент фотоэлектрического поглощения в кремнии. Изображение на представленных топограммах образца и устройства MSCM соответствует кинематическому контрасту.

Кривые дифракционного прохождения

Структурное совершенство кристаллической решетки объемной части пластины с p -каналами было изучено методом двухкристалльных кривых дифракционного прохождения (кривые качания в геометрии (Rocking Curve) Лауэ — LRC). Двухкристалльные LRC были записаны от ортогональных поверхностей образца плоскостей $(2\bar{2}0)$ на трехкристалльном рентгеновском спектрометре ТРС (СКБ ИКАН имени А. В. Шубникова). Источником рентгеновского излучения служила рентгеновская трубка мощностью 1 кВт с молибденовым анодом. В качестве монохроматора использовался плоский кристалл Si(220). Ширина щелей коллиматора была равна 0.02 мм для плоскости дифракции (горизонтальной) и 2 мм для перпендикулярной плоскости (вертикальной).

Электрофизика

Измерения электрических характеристик I , U , R отдельных каналов проводились в соответствии со стандартными методами через контакты, отмеченные на рис. 1, б. Запись кривых P – U фототока как отдельных каналов, так и от монолитного 15-элементного модуля MSCM проводилась на имитаторе импульсного солнечного излучения. Условия измерения соответствовали атмосферной массе AM 1.5D, плотность мощности падающего излучения составляла 1000 Вт/м^2 , температура модуля — 300 К, сопротивление нагрузки $R = 10 \text{ Ом}$. В ходе исследования были измерены ток и плотность тока короткого замыкания I_{sc} и J_{sc} , напряжение холостого хода и U_{oc} и эффективность преобразования солнечной энергии E_{ff} .

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Структурные исследования

На рис. 3 представлены фрагменты SEM-изображений поверхности (а), скола (б) и микрофотографии поверхности (в) одного и того же участка p -канала шириной 100–110 мкм. Хорошо видно (рис. 3, а), что вид рельефа поверхности канала Si(Al) практически не отличается от вида поверхности матрицы пластины (Si). По всей поверхности изображения наблюдаются слабоконтрастные фигуры травления в виде размытых треугольников, что характерно для поверхности Si(111). Наиболее характерными деталями на SEM-изображении поверхности канала являются его границы (1, 2), состоящие из скопления мелких неоднородных по

интенсивности рассеяния участков и ямок травления в виде скоплений равносторонних треугольников (А, В) со сторонами {112}. Ямки травления появляются из-за локальных изменений скорости травления кристалла в местах с неоднородной деформацией. Деформация кристаллической решетки на границах (1, 2) канала вызвана ступенчатым изменением ее состава из-за внедрения в p -канал атомов алюминия. Наличие ямок травления (А) вдоль центра канала, вероятнее всего, связано с локальной деформацией в центре канала вблизи поверхности образца [19].

На изображении скола образца в области канала (рис. 3, б) видно, что p -канал является однородной вертикальной сквозной областью по толщине пластины. Отметим, что получение скола перпендикулярно сечению канала и поверхности пластины является трудной задачей из-за механических напряжений образца, вызванных предшествующим высокотемпературным процессом. Из-за этого на сколе образца наблюдается искривление, размытость и искажение размеров p -канала ближе к тыльной (нижней) поверхности. Четкие границы как поверхности канала, так и его торца видны на сколе вблизи верхней части пластины. Из-за геометрических искажений ширина канала выглядит уже, чем на рис. 3, а. Для сравнения на рис. 3, в приведено оптическое изображение этого же p -канала. Согласно рис. 3, в ширина канала равна 107 мкм, что согласуется с шириной по данным SEM (см. рис. 3, а). Отметим, что границы канала на оптическом изображении видны из-за теневых эффектов, связанных с углублением поверхности канала из-за более высокой скорости травления относительно нелегированной части пластины.

К нижней части пластины канал уширяется и достигает 140–150 мкм. Увеличение ширины p -канала вблизи его выхода на тыльную поверхность пластины является естественным и закономерным эффектом, сопровождающим процесс термомиграции при постоянном градиенте температуры [8]. Одной из существенных проблем при формировании массивов p -каналов является минимизация этого эффекта или его учет.

Кроме этого, как отмечалось выше, возможно влияние соседних p -каналов друг на друга в процессе их формирования. На рис. 4 представлены изображения участков поверхности (а) и скола (б) соседних каналов Si(Al), сформированных в виде квадратов на поверхности пластины Si(111). Скол образца был получен вблизи места пересечения каналов.

На рис. 4, б видно, что по мере формирования каналов Ch -А и Ch -В переменного сечения их внешние границы (*out*) выглядят резкими с минимальными искажениями. В то же время на внутренних границах (*in*) обоих каналов наблюдаются изломы, приводящие к заметному

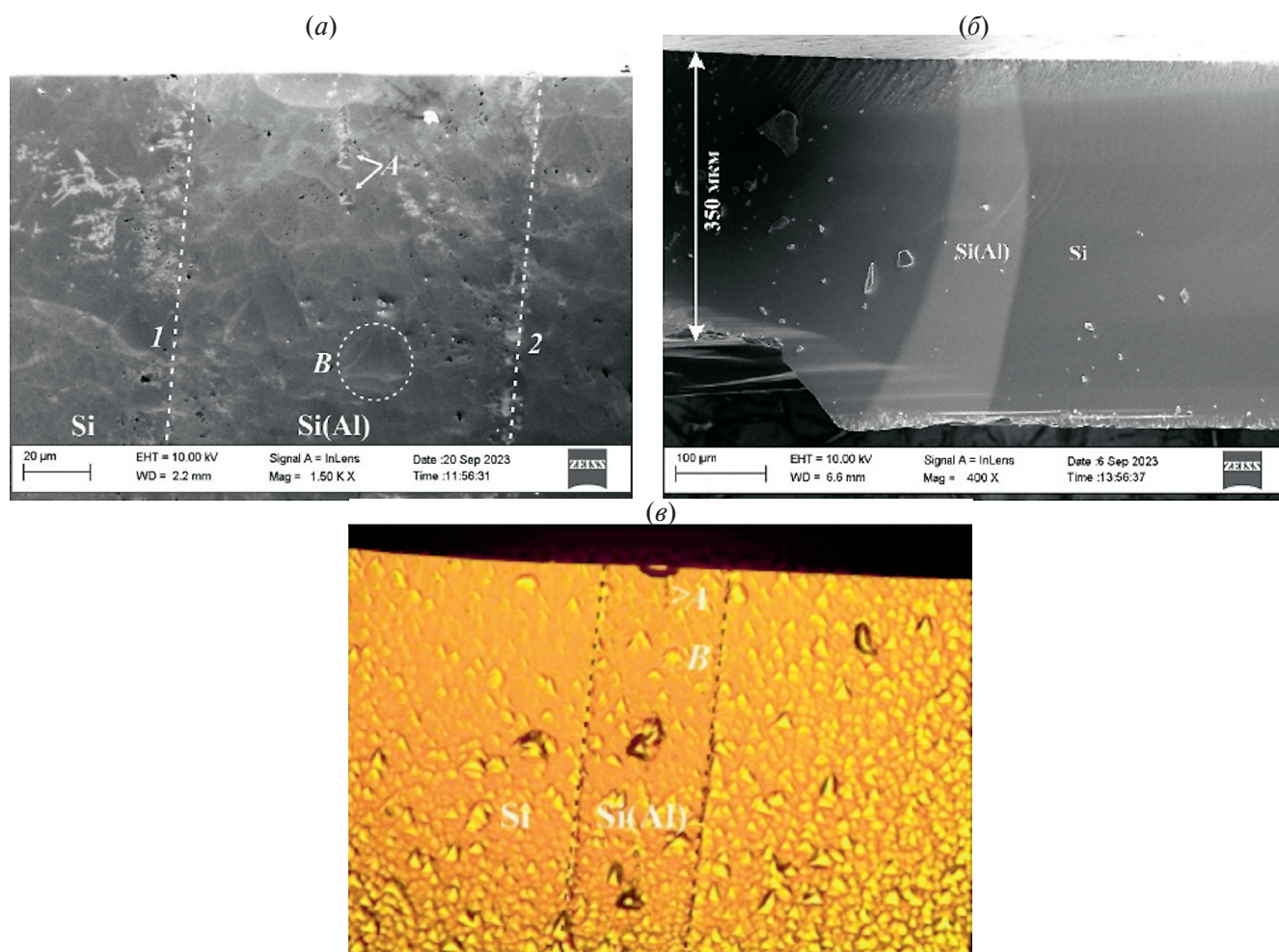


Рис. 3. Фрагменты SEM-изображений (а, б) и микрофотография (в) одного и того же участка поверхности Si(111) (а, в) и скола (б) термомиграционного p -канала Si(Al), ориентированного на поверхности пластины вдоль направления $[11\bar{2}]$.

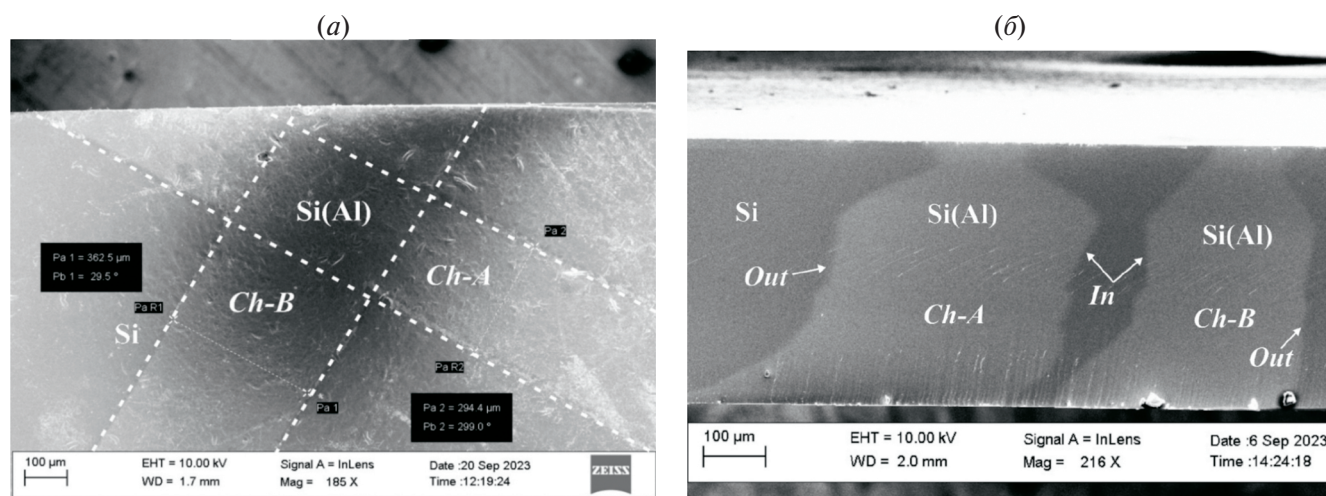


Рис. 4. Фрагменты SEM-изображений тыльной поверхности Si(111) (а) и скола (б) двух соседних термомиграционных каналов Si(Al), ориентированных вдоль направления $[11\bar{2}]$ и $[1\bar{1}0]$.

искажению формы каналов и изменению их ширины. Видно, что эти искажения ТМ-каналов наблюдаются при примерном равенстве ширины

канала и межканального расстояния. По-видимому, здесь проявляется эффект влияния теплового поля соседних расплавов Al(Si) на процесс

перекристаллизации на границе фаз (стенок каналов) из-за изменения температуры переохлаждения. Кроме того, сформированные участки канала создают напряжения в матрице пластины, что также должно влиять на формирующийся канал. Оценить размеры этих полей напряжения кристаллической решетки можно на основе данных рентгеновской проекционной топографии и двухкристалльных кривых прохождения.

На рис. 5 показаны рентгеновские проекционные топограммы исследуемой пластины с p -каналами Si(Al). Каналы визуально видны в виде параллельных полос переменной контрастности. Более светлые полосы соответствуют центральной области каналов. Плотность изображения совпадает со средней плотностью пластины.

Контраст полос показывает, что внутренние части каналов являются монокристаллическими областями с достаточно совершенной структурой. Полосы, наблюдаемые в областях пластины, представляют собой полосы скольжения вдоль направлений $\langle 011 \rangle$, которые образуются из-за радиальных тепловых напряжений, возникших во время процесса термомиграции. Таким образом, каналы, а также области между каналами представляют собой довольно совершенный монокристалл с низкой плотностью дислокаций. Темные полосы по обе стороны канала соответствуют его границам и вызваны искажениями кристаллической решетки из-за внедрения примесных атомов алюминия в решетку кремния с концентрацией $C_{Al} \sim (1-2) \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$ [25, 26]. Контраст изображения, связанного с деформацией на границе p -каналов, определяется условием экстинкции и не наблюдается при $g\epsilon = 0$, где ϵ и g — градиент поля деформации

и вектор дифракции соответственно [27]. Можно видеть, что ширина полос (изображение границ) значительно изменяется в зависимости от направления вектора дифракции g относительно линии канала (срав. рис. 5, а и б).

Считается [6], что металлургические границы каналов довольно резкие и смещаются в глубину пластины от 2 до 20 мкм из-за диффузии атомов примеси при формировании канала термомиграции. Однако дифракционное изображение границ канала связано с полем деформации, которое может значительно превышать ширину металлургических границ, что наблюдается на топограммах. Необходимо отметить, что размер поля деформации связан с чувствительностью методики, которой проводят ее измерение. На рис. 5, а наблюдаемая ширина границы канала составляет 200–300 мкм. Границы структурно совершенных каналов не должны были бы наблюдаться на топограмме (рис. 5, в). Их появление в первую очередь связано с наличием границ на фронтальной и тыльной поверхностях пластины. Кроме того, появление границ стенок p -канала может быть обусловлено смещением относительно выбранной кристаллической плоскости, изменением ширины канала по глубине пластины, локальным изгибом кристаллических плоскостей и формированием рельефа, а также наличием микродефектов на границе канала.

На фрагментах топограмм (см. рис. 5, б, в) на границах каналов наблюдаются полупетли дислокаций. Они лежат на границах каналов в приповерхностных слоях матрицы кремниевых пластин. В исследуемом образце их разбег от центра канала составил до 5 его ширин. Эти дислокации

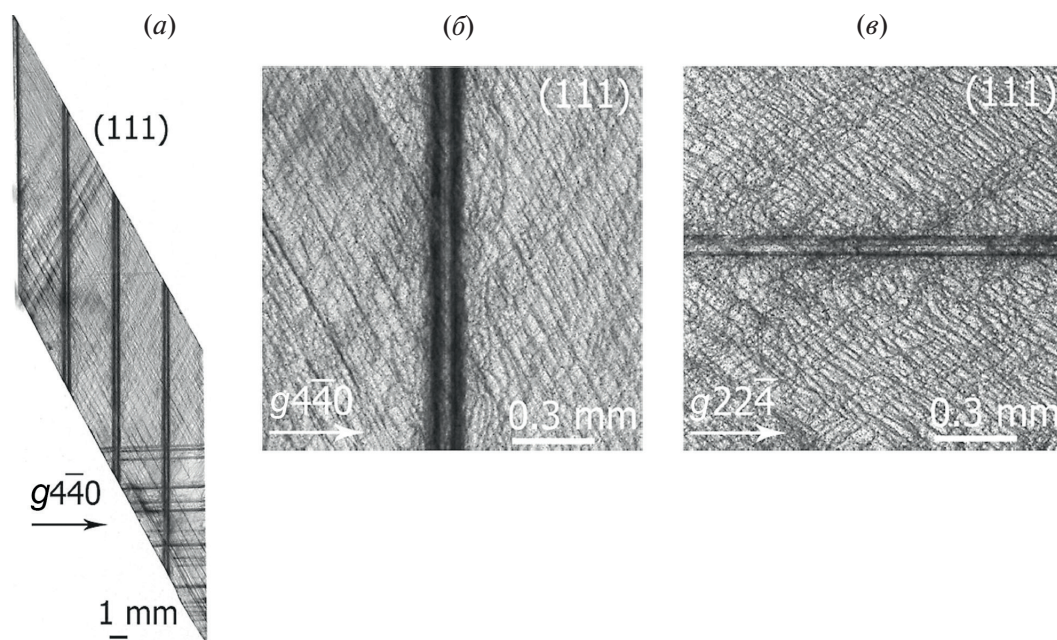


Рис. 5. Фрагменты проекционных топограмм с массивом сквозных вертикальных ThM каналов Si(Al), сформированных вдоль направления пластины Si(111). Отражения: $g \parallel (440)$ (а), (б) и $g \parallel (224)$ (в). Излучение $AgK\alpha_1$.

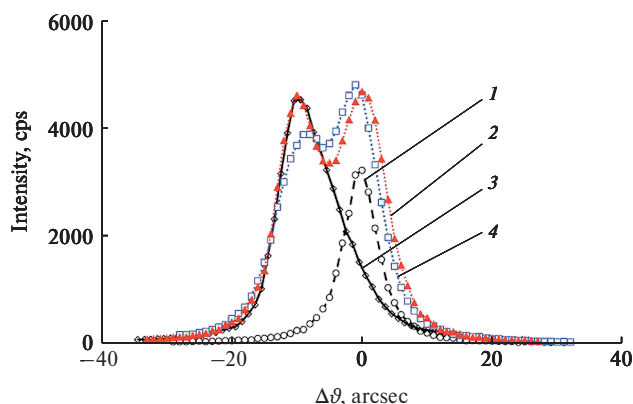


Рис. 6. Кривые дифракционного прохождения 220 отражения в области ThM канала Si(Al) в матрице Si(111) в зависимости от положения рентгеновского пучка относительно центра канала: $x = 350$ (1), 50 (2), 0 (3), -50 мкм (4). Излучение $\lambda = 0.070931$ нм.

образуются из-за частичной релаксации напряжений вблизи выхода канала на поверхность пластины. Дислокации несоответствия в объеме образца на границе раздела канал – матрица не наблюдаются. В данном случае граница между p -каналом и матрицей пластины является когерентной. Сравнительные исследования структурных дефектов в структуре ThM p -слой Si(Al) ($C_{Al} \sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $T = 1350 \text{ K}$) на подложке Si(111) толщиной 10–60 мкм не обнаружили появление дислокаций несоответствия [26] и подтвердили возможность формирования когерентных границ в таких структурах.

Необходимо отметить, что на топограммах (см. рис. 5) видны дислокации, проходящие сквозь канал из матрицы пластины. Они будут являться цепями короткого замыкания при работе p – n -перехода. И, наконец, характерной чертой дифракционного изображения p -канала на топограммах вне зависимости от направления вектора дифракции является узкая темная линия, проходящая вдоль центра канала. Сопоставляя ее положение с изображениями электронной и оптической микроскопии на рис. 3, можно предположить, что она связана с деформацией кристаллической решетки канала вблизи поверхности. Влияние этих деформаций на p – n -переход (см. рис. 1, б) должно усиливаться при сужении канала и исследоваться отдельно.

На рис. 6 показаны экспериментальные двух-кристалльные кривые дифракционного прохождения в геометрии Лауэ в зависимости от места x падения рентгеновского пучка относительно центра канала (см. рис. 1, б). В эксперименте положение образца смещалось в латеральном направлении с шагом 10 мкм.

Видно, что форма, полуширина кривых и угловое положение максимумов зависят от величины сдвига x . Кривая LRC, записанная вдали от центра канала Si(Al), при $x = 350$ мкм или больших отступах имеет минимальную полуширину и более низкий коэффициент отражения. Ранее было показано

[18], что такие кривые соответствуют дифракции от монокристаллов кремния. Это подтверждает, что несмотря на проведенный процесс термомиграции и появившиеся в объеме пластины дислокации (см. рис. 4) матрица пластины, в среднем, еще достаточно совершенна. При дальнейшем увеличении смещения $x \geq \pm 350$ мкм от центра канала параметры кривой LRC (1) не изменялись вплоть до границы аналогичных полей деформации следующего канала. Анализ формы, ширины коэффициента отражения кривой LRC (3), полученной при падении рентгеновского пучка в центр канала при $x = 0$, показывает, что канал представляет собой достаточно совершенную монокристаллическую область. Этот результат подтверждает выводы рентгеновской топографии (см. рис. 5) о монокристаллической средней кристаллической решетке в канале. Вклад диффузного рассеяния от дислокаций в канале в кривую LRC (3), по-видимому, незначителен. Асимметричность “хвостов” кривой LRC связана с измененным межплоскостным расстоянием кристаллической решетки канала относительно матрицы пластины и структурными искажениями на его границе. Наличие искажений средней решетки на границе p -канал – матрица пластины хорошо демонстрируется кривыми (2) и (4) (см. рис. 6), на которых наблюдается два уширенных пика. В рамках теории упругости ожидаемое угловое расстояние между пиками на кривых (2) и (4) (луч излучения при смещении его относительно $x = 0$) захватывает канал и матрицу пластины) не может превышать 1–2 угловых секунды. Чтобы объяснить это несоответствие, появление двух пиков на кривых отражения в [18] было отнесено к заметным структурным искажениям кристаллической решетки в канале: деформация $\varepsilon = 2.7 \times 10^{-5}$, изгиб плоскостей, параллельных границе канала радиусом 1.7 м, и градиент деформации внутри канала $\nabla \varepsilon = 10^{-4}$.

U–I–R-измерения

Испытания n – p – n -структуры на “пробой” проводились при подаче постоянного напряжения на контакты A и B (см. рис. 1, б). На рис. 7, а показаны обратные вольт-амперные характеристики для отдельных n – p – n -структур (два p – n -перехода включенных встречно друг другу). Видно, что I – U кривые (1, 2) симметричны в первом и третьем квадрантах.

Это свидетельствует об эквивалентности свойств этих n – p и p – n встречных переходов на противоположных границах (сторонах) p -канала с матрицей образца. Максимальное полученное значение обратного напряжения, равное 500 В (начало возникновения лавинообразного увеличения обратного тока на кривой 1), соответствует высокому качеству этого p – n -перехода. Вместе с тем наблюдаются и более низкие значения 200 В на протяжении пробы (см. кривую 2). По сравнению с теоретически рассчитанной зависимостью $I(U)$ (3) обратные ветви измеренных кривых (1, 2)

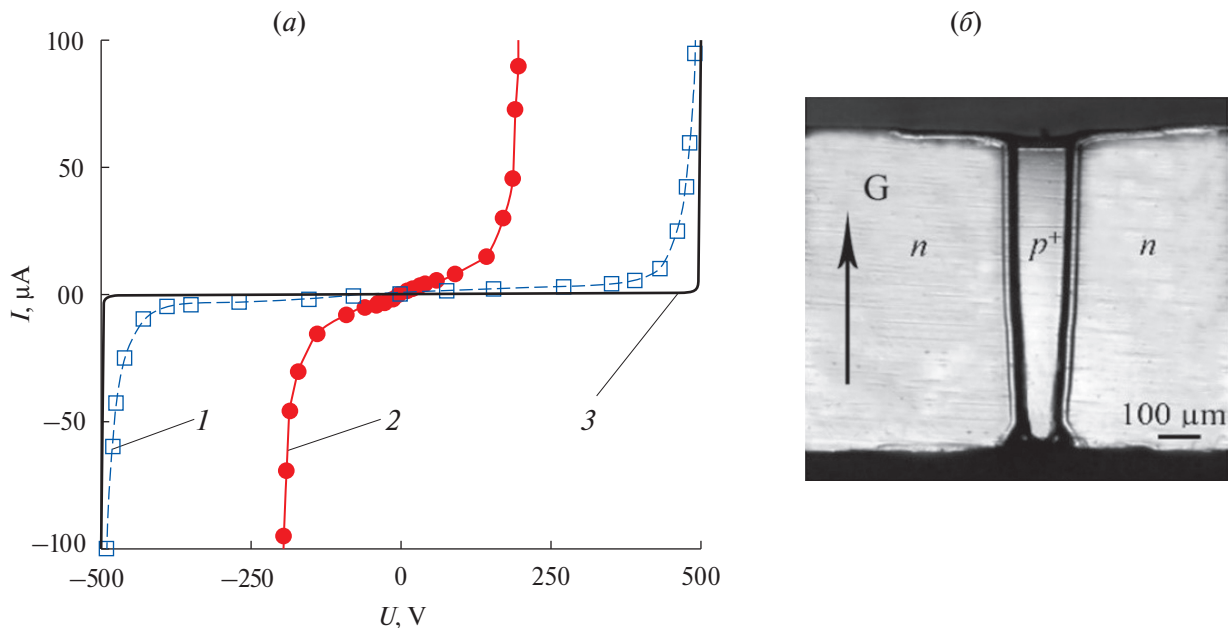


Рис. 7. Обратные характеристики $I(U)$ (1, 2) для отдельных $n-p-n$ -структур (см. рис. 1, б) образца и модельная кривая $I(U)$ (3) для кремниевой пластины n -типа ($P, 1014 \text{ см}^{-3}$) (а); металлургическая микрофотография канала SiAl (б); G — направление градиента температуры при термомиграции.

являются “мягкими”. Измеренные “мягкие” кривые в меньшей степени связаны с объемом канала, чем с его участками вблизи поверхности пластины. Такие кривые $I(U)$ характеризуются повышенными поверхностными токами утечки из-за остаточных примесей и микрочастиц во время подготовки образца к измерениям, различиями в свойствах поверхности структуры и окружающей среды. Кроме того, наблюдаемое снижение напряжения пробоя в значительной степени зависит от плохо контролируемых искажений рельефа поверхности вблизи канала, как на лицевой (входной), так и на тыльной (выходной) стороне образца. Важным фактором, снижающим величину напряжения пробоя, является наличие сквозных дислокаций, обнаруживаемых методом рентгеновской топографии (см. рис. 5, б, в). Их количество увеличивается при повышении температуры процесса термомиграции за счет латерального градиента температуры, увеличения текучести кремния [16].

На рис. 8, а показаны измеренные вольт-амперные характеристики $p-n$ -переходов, образованных обеими границами (см. рис. 1, б) p -канала образца. Видно, что существенных различий в значениях $I(U)$ между $p-n$ -переходами не наблюдается. В реальных устройствах представляет интерес механизм протекания тока через сформированный $p-n$ -переход. Он может быть описан моделью Саха, Нойса и Шоки [28] через параметр α в формуле

$$I = I_0 \left(e^{\frac{qU}{\alpha kT}} - 1 \right),$$

где I_0 — насыщение ячейки темновым током; $q = 1.6 \times 10^{-19} \text{ Кл}$ — заряд электрона;

α — безразмерный коэффициент; $k = 1.38 \times 10^{-23} \text{ Дж/К}$ — постоянная Больцмана; T — рабочая температура ячейки, К.

Результаты измерений прямых характеристик $I(U)$ показывают, что параметр $\alpha = 1.54$ для исследованных термомиграционных переходов. Следовательно, ток, протекающий через $n-p$ -переходы, имеет компоненты диффузии и рекомбинации сопоставимой величины. Ток насыщения I_0 (оцененный экстраполяцией до $U = 0$) равен $\sim 10^{-8} \text{ А}$. Полученные данные указывают на наличие токов утечки вблизи электронно-дырочного перехода в местах выхода p -канала на поверхность образца. На поверхности всегда имеются дефекты, которые приводят к появлению заряда и, следовательно, к появлению сопротивления утечке, шунтирующего $p-n$ -переход. Видно, что поверхностные токи утечки почти на четыре порядка превышают теоретически рассчитанный обратный ток.

На рис. 8, б показаны измерения сопротивления $R(I)$ каналов Si(Al) различной ширины (50–200 мкм) в кремниевой подложке толщиной 500 мкм, сформированной при температуре 1300–1400 К. Видно, что при уменьшении ширины канала его сопротивление $R(I)$ увеличивается экспоненциально. Увеличение температуры процесса термомиграции приводит к снижению R . Концентрация легирующей примеси в канале термомиграции для стандартных кремниевых пластин и малых значений коэффициента распределения твердое вещество — жидкость (solid-liquid distribution coefficient) (например, Sb, Al) предполагается однородной [6, 8, 29]. Поведение кривых $R(I)$ показывает, что в узких (менее 100 мкм) каналах могут появляться

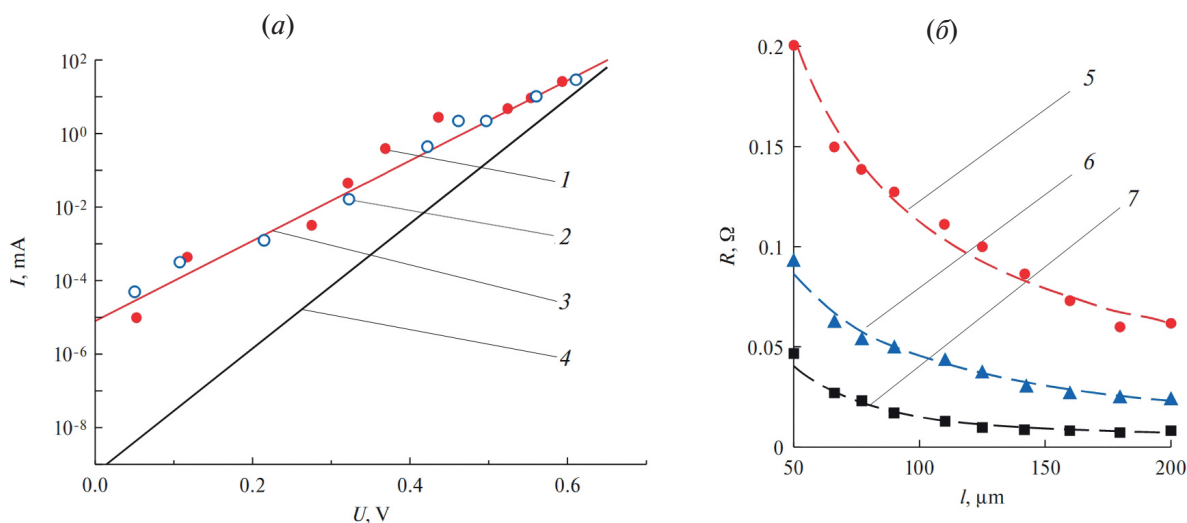


Рис. 8. $I(U)$ -характеристики p – n -переходов AC (1) и BC (2) на границе p -канала (см. рис. 1, б). Сплошные линии (3), (4) представляют собой моделирование резкого p – n -перехода для Si n -типа ($\rho = 45 \text{ Ом} \times \text{см}$ с $\alpha = 1.54$ и $\alpha = 1$ соответственно (а); температурные зависимости сопротивления R от ширины l канала Si(Al) для $T = 1300 \text{ K}$ (5), 1350 K (6) и 1400 K (7) (б).

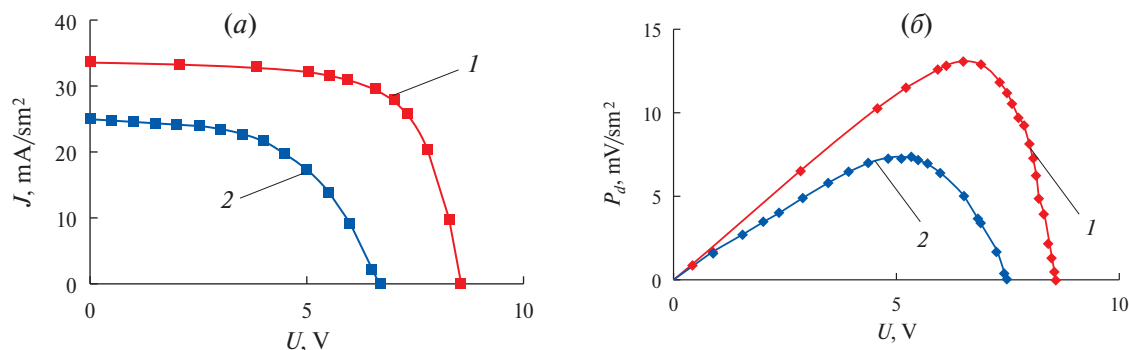


Рис. 9. Характеристики $J-U$ (а) и P_d-U (б) для монокристаллических солнечных модулей МНСМ при мощности излучения $1000 \text{ Вт}/\text{м}^2$. На обоих рисунках: 1 — эталонный модуль #А; 2 — дефектный модуль #В.

структурные дефекты, влияющие на проводимость канала. Измеренное удельное сопротивление каналов p -типа находится в диапазоне от 0.01 до $0.05 \text{ Ом} \times \text{см}$. Было показано [26], что в случае кремния концентрация примеси может меняться от 1×10^{19} до $2 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Значения концентраций алюминия в ТМ каналах, полученные с помощью SIMS и рентгеновской дифрактометрии [30], хорошо согласуются с этими данными.

$P-I-U$ -измерения

Сравнительные исследования эффективности фотопреобразования монокристаллического солнечного модуля были проведены на двух образцах МНСМ: #А — эталонный (с максимальными фотоэлектрическими параметрами) и #В — дефектный (с заниженными рабочими характеристиками). Фотоэлектрические характеристики как отдельных $i = 1, 2, \dots, 15$ элементов, так и их групп в модулях #А и #В были измерены в атмосфере в условиях солнца АМ 1.5D. Эффективность фотопреобразования модулей #А и #В: плотность

тока J , плотность мощности P_d от генерируемого напряжения U показаны на рис. 9.

Максимальные величины плотности тока и генерируемой мощности при фотопреобразовании были получены при использовании модуля #А. Для него напряжение холостого хода U_{oc} и плотность тока короткого замыкания составляли 8.5 В и $33 \text{ мА}/\text{см}^2$ соответственно (рис. 9, а), при этом коэффициент заполнения вольт-амперной характеристики FF был выше 0.7 . Эффективность E_{ff} эталонного модуля составила 13.1% . Фотоэлектрические характеристики для модуля #В оказались заметно ниже: $U_{oc} = 6.7 \text{ В}$, $J_s = 25 \text{ мА}/\text{см}^2$, $E_{ff} = 7.3\%$.

Чтобы изучить фотоэлектрические свойства модуля, мы измерили значения J_{sc} , U_{oc} и E_{ff} для каждого солнечного элемента. Результаты представлены на рис. 10.

Отметим, что в нашем эксперименте генерируемая на основе первых 8 элементов мощность P_d модуля #В практически не меняется. Параметры

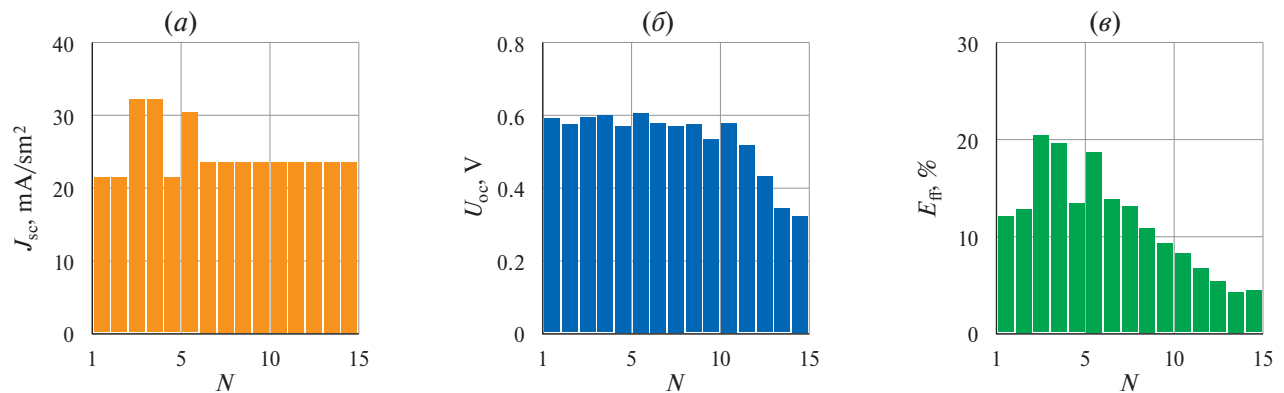


Рис. 10. Плотность короткого замыкания J_{sc} (а), напряжение холостого хода U_{oc} (б) и коэффициент полезного действия E_{Π} (в) для i -го солнечного элемента модуля #В (мощность излучения 1000 Вт/м², $T_{sc} = 25^{\circ}\text{C}$).

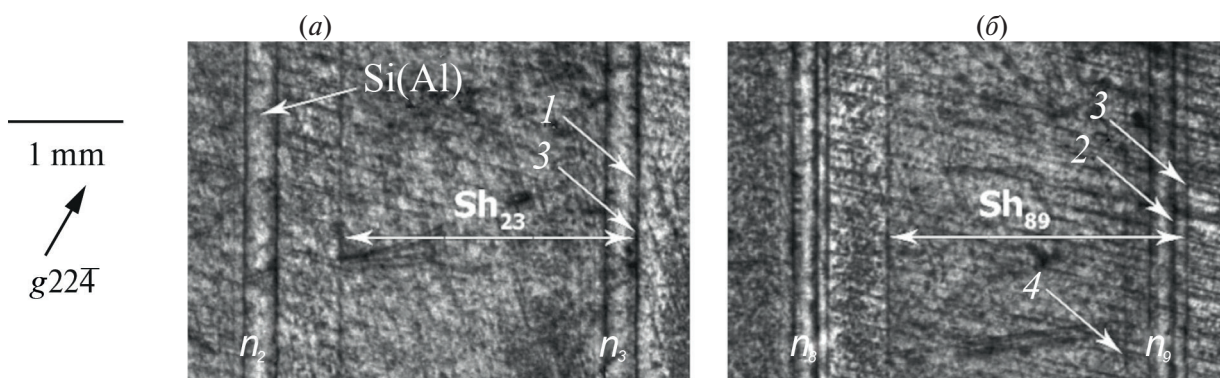


Рис. 11. Фрагменты рентгеновской проекции топограммы по методу Ланга 15-элементного MSCM-модуля (см. рис. 2) с совершенными (а) и дефектными (б) солнечными элементами: Sh_{23} , Sh_{89} — Ag-шунты между каналами на задней стороне модуля; 1, 2 — рабочий p — n -переход; 3 — граница Ag-шунтов; 4 — левая граница разделительной канавки; n_i — номер p -канала. Отражение — 224, излучение — $\text{MoK}\alpha_1$.

фотопреобразования монолитного солнечного модуля определяются рабочими характеристиками каждого входящего в него солнечного элемента и зависят от различных факторов. В частности, эти параметры зависят от удельного сопротивления p -канала, участков границы с коротким замыканием, ловушками в p — n -переходе, сопротивлением контактов и “размерными” дефектами, созданными при изготовлении модуля.

На рис. 11 показаны фрагменты рентгеновской проекционной топограммы модуля #В с изображениями эффективных (а) и дефектных (б) p -каналов. Необходимо отметить, что на топограмме видны дифракционные изображения деталей как на лицевой, так и на тыльной стороне модуля.

На рис. 11, а и б хорошо видны дифракционные изображения p -каналов Si(Al) n_2 , n_3 , n_8 и n_9 в виде параллельных более светлых полос с боковыми тонкими черными линиями, аналогичных полосам, показанным на рис. 5, в. Хорошо проявляются (срав. с рис. 2) границы серебряных шунтов Sh_{23} , Sh_{89} между p -каналами n_2 , n_3 и n_8 , n_9 . Правые границы шунтов Sh_{23} и Sh_{89} отмечены стрелками 3. Наиболее интересно расположение рабочих

p — n -переходов, совпадающих с границами каналов: (n_2 , n_3) и (n_8 , n_9) соответственно. Стрелки 1 и 2 указывают “рабочие” границы каналов n_3 и n_9 во фрагментах (а) и (б) соответственно. Видно, что расположение правой границы 3 контактной пленки Sh_{89} выходит за пределы канала и попадает в область матричного кремния. Такое относительное смещение границ p -канала и шунта вероятнее всего приводит к короткому замыканию рабочего p — n -перехода на тыльной стороне модуля. Этот размерный дефект наблюдается, начиная с 8-го канала для модуля #В. Подчеркнем, что для первых семи каналов модуля границы канала с рабочим p — n -переходом и границы шунта Ag совпадают. Такое смещение границы контактной пленки (3) на фрагменте (б) должно привести к короткому замыканию рабочего p — n -перехода и уменьшению значений тока. Это наблюдение полностью соответствует форме кривой, показанной на рис. 10, а, где наблюдается резкое уменьшение тока короткого замыкания J_{sc} , начиная с канала 7. Мы полагаем, что смещение границ, а также уменьшение ширины каналов SiAl обусловлены наличием радиального градиента теплового поля в процессе термомиграции. На полной топограмме MSCM слева от

каналов видны слабые черные линии (стрелка 4). Их положение соответствует границе разделительной канавки между солнечными элементами. Возможно, что процесс лазерной абляции, образовавший разделительные канавки, был нестабильным.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлены результаты комплексных исследований реальной структуры и электрических свойств массива сквозных вертикальных p -каналов в пластине Si(111), а также фотовольтаических свойств 15-элементного монокристаллического модуля. Массивы p -каналов шириной 100 мкм были получены методом термомиграции алюминия при температурах 1300–1450 К. Структурная характеристика каналов была проведена методами растровой электронной микроскопии, рентгеновской проекционной топографией и кривыми качения геометрии дифракции Лауэ.

Установлено, что величина обратных пробивных напряжений в элементе структуры $n-p-n$ (на основе p -канала) достигает 500 В. Ток насыщения I_0 на полученных рабочих переходах не превышает 10^{-8} А. Удельное сопротивление каналов, в зависимости от ширины канала и температуры процесса термомиграции, находится в диапазоне от 0.01 до 0.05 Ом×см. Если ширина канала p -типа, образованного при $T = 1450$ К, менее 100 мкм, его удельное сопротивление увеличивается нелинейно, что может ограничить количество возможных каналов на единицу длины солнечного модуля. Показано, что одним из основных структурных дефектов Si-пластин с каналами SiAl является отклонение плоскости канала p -типа от нормали к поверхности пластины. Это приводит к снижению эффективности как соответствующего солнечного элемента, так и всего модуля. Ясно, что формирование многоканальной структуры — чрезвычайно сложный процесс, включающий множество тонких особенностей, которые до сих пор неизвестны и должны быть поняты в будущем исследовании.

И, наконец, в работе представлены измеренные фотоэлектрические свойства для эффективного монокристаллического горизонтального 15-элементного солнечного модуля с КПД 13.1%, напряжением холостого хода 8.5 В и плотностью тока короткого замыкания 33 мА/см². Для сравнения приведены свойства модуля с низкой эффективностью, показано и обсуждается влияние “размерных” дефектов. Следует отметить, что полученные характеристики отдельных солнечных элементов имеют сопоставимые значения с основными фотоэлектрическими параметрами обычных планарных аналогов, несмотря на конструктивные особенности p -каналов и наличие структурных искажений вблизи их границ с матрицей подложки. Конечно, современные солнечные элементы A_3B_5 со встроенным каскадом внутренних областей на основе простых структур обладают более высокой эффективностью

(до 40–50%). Тем не менее многоэлементные модули MSCM могут быть использованы для изготовления солнечных модулей с любым выходным напряжением, пропорциональным количеству элементов, и они, в силу конструктивных особенностей, более надежны.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания Южно-Российскому государственному политехническому университету (НПИ) им. М.И. Платова по теме FENN-2023-0005 и при частичной поддержке Государственного задания ФТИАН им. К.А. Валиева РАН по теме № FFNN-2022-0019. Часть экспериментальной работы выполнена при инструментальной поддержке Центра коллективного пользования “Исследования наноструктурных, углеродных и сверхтвердых материалов” ФГБНУ ТИСНУМ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Markvart T., Castafier L. Practical Handbook of Photovoltaics: Fundamentals and Applications. Oxford — New York — Tokyo: Elsevier Science Ltd., 2003.
2. Philipps S.P. et al. Present Status in the Development of III — V Multi-Junction Solar Cells. In: *Cristóbal López A., Martí Vega A., Luque López A.* (eds). Next Generation of Photovoltaics. Springer Series in Optical Sciences. 2012. V. 165. Springer, Berlin, Heidelberg. https://doi.org/10.1007/978-3-642-23369-2_1
3. Da X., Chen C., Deng Y., Wood A., Yang G., Fei C., Huang J. Pathways to High Efficiency Perovskite Monolithic Solar Modules // PRX ENERGY1, 013004 (2022). DOI: 10.1103/PRXEnergy.1.013004.
4. Ryan C. Chiechi, Remco W.A. Havenith, Jan C. Hummelen, L. Jan Anton Koster, Maria A. Loi. Modern Plastic Solar Cells: materials, mechanisms and modeling // Materials Today. 2013. V. 16. P. 281.
5. Ryan M. France, John F. Geisz, Tao Song, Waldo Olavarria, Michelle Young, Alan Kibbler, Myles A. Steiner. Triple-junction solar cells with 39.5% terrestrial and 34.2% space efficiency enabled by thick quantum well superlattices // Joule 6 (5), 1121–1135, May 18, 2022. 1123. doi.org/10.1016/j.joule.2022.04.024
6. Anthony T.R., Cline H.E. Lamellar devices processed by thermomigration, J. Appl. Phys. 1977. V. 48. P. 3943–3949.
7. Pfann W.G. Zone Melting. 2nd Ed. New York: Wiley, 1963.
8. Lozovskii V.N., Lunin L.S., and Popov V.P. Temperature-Gradient Zone Recrystallization of Semiconductor Materials. M.: Metallurgiya, 1987.
9. Lozovskii V.N., Udaynskaya A.I. Investigation of the Mechanism of Silicon Crystallization from an Aluminum-Silicon Melt by Temperature Gradient Zone Melting // Sov. Phys. Crystallography. 1968. V. 13. № 3. P. 565–566.
10. Lozovskii V.N., Popov V.P. On the stability of the growth front during crystallization by the moving solvent method // Sov. Phys. Crystallography. 1970. V. 15. № 1. P. 149–154.

11. *Cline H.E., Anthony T.R.* Thermomigration of aluminum-rich liquid wires through silicon // *J. Appl. Phys.* 1976. V. 47. № 6. P. 2332–2336.
12. *Buchin E.Y., Denisenko Y.I., Simakin S.G.* The structure of thermomigration channels in silicon // *Technical Physics Letters*. 2004. V. 30. № 3. P. 205–207.
13. *Norskog A.C., Warner Jr.R.M.* A horizontal monolithic series-array solar battery employing thermomigration // *J. Appl. Phys.* 1981. V. 52. № 3. P. 1552–1554.
14. *Lozovskii V.N., Lomov A.A., Lunin L.S., Seredin B.M., Chesnokov Yu.M.* Crystal Defects in Solar Cells Produced by the Method of Thermomigration // *Semiconductors*. 2017. V. 51. № 3. P. 285–289.
15. *Eslamian M., Saghir M.Z.* Thermomigration Applications in MEMS, NEMS and Solar Cell Fabrication by Thermal Metal Doping of Semiconductors // *FDMP*. 2012. V. 8. № 4. P. 353–380.
16. *Реньян В.Р.* Технология полупроводникового кремния. М.: Металлургия, 1969.
17. *Jasurbek G., Rayimjon A., Bobur R.* Effect of the Local Mechanical Stress on Properties of Silicon Solar Cell // *Journal of Mechanical Engineering Research and Developments*. 2021. V. 44. № 9. P. 125–133.
18. *Lomov A.A., Punegov V.I., and Seredin B.M.* Laue X-ray diffraction studies of the structural perfection of Al-doped thermomigration channels in silicon // *J. Appl. Cryst.* 2021. V. 54. P. 588–596.
19. *Lomov A.A., Punegov V.I., Belov A.Yu., Seredin B.M.* High resolution X-ray Bragg diffraction in Al-doped thermomigration channels in silicon // *J. Appl. Cryst.* 2022. V. 55(3). P. 558–568.
doi.org/10.1107/S1600576722004319
20. *Morillon B.* Etude de la thermomigration de l'aluminium dans le silicium pour la réalisation industrielle de murs d'isolation dans les composants de puissance bidirectionnels. Micro and nanotechnologies // *Microelectronics*. 2002. P. 222.
21. *Середин Б.М., Ломов А.А., Заиченко А.Н., Гаврус И.В., Пащенко А.С., Малибашев А.В., Рубан Л.В.* Электрические свойства кремниевых высоковольтных фотопреобразователей на основе сквозных термомиграционных каналов // *Физика. СПб.: Политех-Пресс*, 2021. С. 456–458.
22. *Середин Б.М., Попов В.П., Гаврус И.В., Заиченко А.Н.* Применение локальной перекристаллизации кремния алюминием в фотовольтаике // *Моковские чтения*. М.: НИЯУ МИФИ, 2023. С. 146–147.
23. *Лозовский В.Н., Попов В.П., Даровский Н.И.* Стартовая нестабильность линейных и точечных зон при зонной плавке с градиентом температуры. Кристаллизация и свойства кристаллов: сборник трудов. Новочеркасск, 1970. Т. 208. С. 39–43.
24. *Полухин А.С.* Термомиграция неориентированных линейных зон в кремниевых пластинах (100) для производства чипов силовых полупроводниковых приборов // *Компоненты и технологии*. 2008. № 11. С. 97–100.
25. *Takeshi Yoshikawa and Kazuki Morita.* Solid Solubilities and Thermodynamic Properties of Aluminum in Solid Silicon // *Journal of The Electrochemical Society*. 150 ~8! G465-G468 ~2003! 0013-4651/2003/150~8!/G465/4/
26. *Seredin B.M., Kuznetsov V.V., Lomov A.A., Zaichenko A.N., Martyushov S.Yu.* Precision silicon doping with acceptors by temperature gradient zone melting // *J. Phys: Conf. Series*. 2019. P. 39–46.
27. *Bowen D.K. & Tanner B.K.* High Resolution X-ray Diffractometry and Topography. London, Bristol: Taylor & Francis, 1998.
28. *Sah C.T., Noyce R.N., Shockley W.* Carrier Generation and Recombination in p–n Junction and p–n Junction Characteristics // *Proceedings of the IRE*. 1957. V. 45. № 9. P. 1228–1243.
29. *Sze S.M., Kwok K.Nc.* Physics of semiconductor devices // A. John Wiley & Sons. Inc. Publ., 2007.
30. *Ломов А.А., Середин Б.М., Мартышов С.Ю., Заиченко А.Н., Шульпина И.Л.* Формирование и структура термомиграционных кремниевых каналов, легированных Ga // *Журнал технической физики*. 2021. Т. 91. № 3. С. 467–474.

STRUCTURAL FEATURES AND ELECTRICAL PROPERTIES OF Si(Al) THERMAL MIGRATION CHANNELS FOR HIGH-VOLTAGE PHOTOVOLTAIC CONVERTERS

© 2024 A. A. Lomov¹, *, B. M. Seredin², S. Yu. Martyushov³, A. A. Tatarintsev¹, V. P. Popov², A. V. Malibashev²

¹Valiev Institute of Physics and Technology of Russian Academy of Sciences,
Moscow, Russia

²Platov South Russian State Polytechnic Institute (NPI), Novocherkassk, Russia

³Technological Institute for Superhard and Novel Carbon Materials,
Troitsk, Russia

*E-mail: lomov@ftian.ru

The results of a study of the structural features and electrical properties of Si(Al) through thermomigration *p*-channels in a silicon wafer are presented. Structural studies were performed using X-ray methods of projection topography, diffraction reflection curves and scanning electron microscopy. It is shown that the channel-matrix interface is coherent without the formation of mismatch dislocations. The possibility of using an array of thermomigration *p*-channels of 15 elements to form a monolithic photovoltaic solar module in a Si(111) silicon wafer based on *p*-channels with a width of 100 microns with walls in the plane is shown. The monolithic solar module has a conversion efficiency of 13.1%, an idle voltage of 8.5 V and a short-circuit current density of 33 mA/cm².

Keywords: thermomigration, *p*–*n* junction, silicon, aluminum, X-ray topography, X-ray rocking curve, *U*–*I*–*R* properties, high voltage solar module

REFERENCES

1. Markvart T., Castafier L. Practical Handbook of Photovoltaics: Fundamentals and Applications. Oxford — New York — Tokyo: Elsevier Science Ltd., 2003. 984 p.
2. Philipps S.P., Cristóbal López A., Martí Vega A., López L. Present Status in the Development of III—V Multi-Junction Solar Cells, Next Generation of Photovoltaics, Springer Series in Optical Sciences. 2012. V. 165. Berlin, Heidelberg: Springer.
https://doi.org/10.1007/978-3-642-23369-2_1
3. Da X., Chen C., Deng Y., Wood A., Yang G., Fei C., Huang J. Pathways to High Efficiency Perovskite Monolithic Solar Modules // PRX ENERGY. 2022. V. 1. P. 013004. <https://doi.org/10.1103/PRXEnergy.1.013004>
4. Ryan C.Ch., Remco W.A., Havenith Jan. C., Hummelen L., Koster Jan A., Loi M.A. Modern Plastic Solar Cells: materials, mechanisms and modeling // Materials Today. 2013. V. 16. P. 281.
5. France R.M., Geisz J.F., Song T., Olavarria W., Young M., Kibbler A., Steiner M.A. Triple-junction solar cells with 39.5% terrestrial and 34.2% space efficiency enabled by thick quantum well superlattices // Joule. 2022. V. 6. No. 5. P. 1121–1135.
<https://doi.org/10.1016/j.joule.2022.04.024>
6. Anthony T.R., Cline H.E. Lamellar devices processed by thermomigration // J. Appl. Phys. 1977. V. 48. P. 3943–3949.
7. Pfann W.G. Zone Melting. 2nd Ed. New York: Wiley, 1963. 236 p.
8. Lozovskii V.N., Lunin L.S., Popov V.P. Zonnaya perekristallizatsiya gradientom temperatury poluprovodnikovoykh materialov. M.: Metallurgiya, 1987. 232 p. [in Russian].
9. Lozovskii V.N., Udaynskaya A.I. Investigation of the Mechanism of Silicon Crystallization from an Aluminum-Silicon Melt by Temperature Gradient Zone Melting // Sov. Phys. Crystallography. 1968. V. 13. No. 3. P. 565–566.
10. Lozovskii V.N., Popov V.P. On the stability of the growth front during crystallization by the moving solvent method // Sov. Phys. Crystallography. 1970. V. 15. No. 1. P. 149–154.
11. Cline H.E., Anthony T.R. Thermomigration of aluminum-rich liquid wires through silicon // J. Appl. Phys. 1976. V. 47. No. 6. P. 2332–2336.
12. Buchin E.Y., Denisenko Y.I., Simakin S.G. The structure of thermomigration channels in silicon // Tech. Phys. Lett. 2004. V. 30. No. 3. P. 205–207.
13. Norskog A.C., Warner Jr.R.M. A horizontal monolithic series-array solar battery employing thermomigration // J. Appl. Phys. 1981. V. 52. No. 3. P. 1552–1554.
14. Lozovskii V.N., Lomov A.A., Lunin L.S., Seredin B.M., Chesnokov Yu.M. Crystal Defects in Solar Cells Produced by the Method of Thermomigration // Semiconductors. 2017. V. 51. No. 3. P. 285–289.
15. Eslamian M., Saghir M.Z. Thermomigration Applications in MEMS, NEMS and Solar Cell Fabrication by Thermal Metal Doping of Semiconductors // FDMP. 2012. V. 8. No. 4. P. 353–380.
16. Renyan W.R. Silicon Semiconductor Technology. McGraw-Hill: McGRAW — Hill Book Company, 1965. 277 p.
17. Jasurbek G., Rayimjon A., Bobur R. Effect of the Local Mechanical Stress on Properties of Silicon Solar Cell // J. of Mech. Eng. Res. and Devel. 2021. V. 44. No. 9. P. 125–133.
18. Lomov A.A., Punegov V.I., Seredin B.M. Laue X-ray diffraction studies of the structural perfection of Al-doped thermomigration channels in silicon // J. Appl. Cryst. 2021. V. 54. P. 588–596.
<https://doi.org/10.1107/S1600576721001473>
19. Lomov A.A., Punegov V.I., Belov A.Yu., Seredin B.M. High resolution X-ray Bragg diffraction in Al-doped thermomigration channels in silicon // J. Appl. Cryst. 2022. V. 55. P. 558–568.
<https://doi.org/10.1107/S1600576722004319>
20. Morillon B. Etude de la thermomigration de l'aluminium dans le silicium pour la réalisation industrielle de murs d'isolation dans les composants de puissance bidirectionnels. Doct. Thesis, Toulouse: INSA de Toulouse, 2002. <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00010945/>
21. Seredin B.M., Lomov A.A., Zaichenko A.N., Gavrus I.V., Pashchenko A.S., Malibashev A.V., Ruban L.V. Elektricheskie svoystva kremnievyykh vysokovol'tnykh fotopreobrazovatelej na osnove skvoznykh termomigratsionnykh kanalov // Fizika. Sankt-Peterburg: Politekh-Press, 2021. P. 456–458 [in Russian].
22. Seredin B.M., Popov V.P., Gavrus I.V., Zaichenko A.N. Primenenie lokal'noy perekristallizatsii kremniya alyuminiem v fotovol'taice // Mokerovskie chteniya. Moskva: NIIEU MIFI, 2023. P. 146–147 [in Russian].
23. Lozovskij V.N., Popov V.P., Darovskij N.I. Startovaya nestabil'nost' lineynykh i tochechnykh zon pri zonnnoy plavke s gradientom temperatury. Sbornik Trudov, Kristallizatsiya i Svoystva Kristallov. Novocherkassk, 1970. V. 208. P. 39–43 [in Russian].
24. Poluhin A.S. Termomigratsiya neorientirovannykh lineynykh zon v kremnievyykh plastinakh (100) dlya proizvodstva chipov silovyykh poluprovodnikovyykh priborov // Komponenty i tekhnologii. 2008. No. 11. P. 97–100 [in Russian].
25. Yoshikawa T., Morita K. Solid Solubilities and Thermodynamic Properties of Aluminum in Solid Silicon // J. Elect. Society. 2003. V. 150. No. 8.
<https://doi.org/10.1149/1.1588300>
26. Seredin B. M., Kuznetsov V.V., Lomov A. A., Zaichenko A.N., Martyushov S.Yu. Precision silicon doping with acceptors by temperature gradient zone melting // J. Phys: Conf. Series. 2019. P. 39–46.
27. Bowen D.K., Tanner B.K. High Resolution X-ray Diffractometry and Topography. London, Bristol: Taylor & Francis, 1998. 252 p.
28. Sah C.T., Noyce R.N., Shockley W. Carrier Generation and Recombination in p—n Junction and p—n Junction Characteristics // Proceedings of the IRE. 1957. V. 45. No. 9. P. 1228–1243.
29. Sze S. M., Kwok K. Ng. Physics of semiconductor devices // A. John Wiley & Sons. Inc. Publ. 2007. 832 p.
30. Lomov A.A., Seredin B.M., Martyushov C. Yu., Zaichenko A.N., Shul'pina I.L. The Formation and Structure of Thermomigration Silicon Channels Doped with Ga // Technical Physics. 2021. V. 66. No. 3. P. 453–460.
<https://doi.org/10.1134/S1063784221030178>

МОДЕЛИРОВАНИЕ

УДК 519.7+544.27

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИИ АТОМОВ В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ В НЕУПОРЯДОЧЕННОМ СОСТОЯНИИ

© 2024 г. С. М. Асадов^{1, 2, *}¹Научно-исследовательский институт “Геотехнологические проблемы нефти, газа и химия”, Баку, Азербайджан²Институт катализа и неорганической химии им. М.Ф. Нагиева Министерства науки и образования

Азербайджана, Баку, Азербайджан

*E-mail: salim7777@gmail.com

Поступила в редакцию 30.12.2023 г.

После доработки 01.02.2024 г.

Принята к публикации 05.02.2024 г.

Теория функционала плотности (DFT) с использованием обобщенного градиентного приближения (GGA) позволила оптимизировать кристаллическую структуру, рассчитать параметры решетки и зонную структуру полупроводниковых соединений TlMS_2 ($M = \text{Ga}, \text{In}$) с моноклинной структурой (пространственная группа $C2/c$, № 15). DFT-расчеты структуры соединений были расширены с использованием двух обменно-корреляционных функционалов GGA-PBE и $\text{GGA} + U$ (U — кулоновский параметр) со значением $U - J = 2.1$ эВ (эффективный параметр взаимодействия). Методом молекулярной динамики (МД) рассчитаны коэффициенты термодиффузии (D_α) атомов отдельных типов (α), т.е. атомов таллия, галлия, индия и серы вблизи температуры плавления соединения TlMS_2 . Значения D_α атомов TlMS_2 получены в приближении локальной нейтральности с использованием канонического ансамбля NVT MD. Значения D_α атомов были скорректированы с учетом среднеквадратичных смещений атомов при заданных времени и температуре. Построены зависимости $D_\alpha = f(1/T)$ атомов TlMS_2 , описываемые законом Аррениуса. Рассчитана энергия активации диффузии атомов.

Ключевые слова: полупроводниковые тройные соединения, слоистая структура, TlGaS_2 и TlInS_2 , DFT GGA, молекулярная динамика, канонический ансамбль NVT MD, коэффициент диффузии, жидкое состояние

DOI: 10.31857/S0544126924020021

1. ВВЕДЕНИЕ

Диффузионные процессы широко используются на различных этапах технологии изготовления полупроводниковых приборов. В ходе технологических операций происходит диффузионное перераспределение атомов и примесей, введенных в полупроводник. Учитывая это, диффузия играет решающую роль в фундаментальных исследованиях и практическом применении полупроводников.

Известно, что агрегатное состояние может оказывать существенное влияние на диффузию атомов в многокомпонентных полупроводниках (МП). Уменьшение размеров полупроводниковых приборов привело к тому, что технологические процессы характеризуются кратковременностью. При этом в МП возникают неравновесные условия; например, может произойти нарушение кристаллической структуры полупроводника и отклонение от равновесия в квазихимических реакциях между структурными компонентами МП. Это приводит

к образованию неравновесных концентраций собственных точечных дефектов, контролирующих диффузию в МП. Ранее был изучен случай больших диффузионных длин частиц, когда в полупроводниках выполняется условие локальной электронейтральности. Однако случай малых диффузионных длин и высоких температур, когда в МП нарушается локальная электронейтральность, изучен слабо.

Низкоразмерные полупроводниковые системы широко исследуются, в частности, в физической химии, микро- и нанoeлектронике. К таким материалам относятся бинарные и тройные сульфиды, например TlMS_2 ($M = \text{Ga}, \text{In}$) [1–4]. Материалы на основе TlMS_2 обладают значительной фото-, магнито- и термочувствительностью [5–14].

Улучшение физико-химических свойств полупроводниковых материалов связано, в частности, с успехами современной технологии, физической химии и химической физики.

Изучение физических явлений, таких как транспорт частиц, позволяет управлять структурой и превращениями химических веществ. Характеристики явлений переноса и механизмов взаимодействия частиц расширяют возможности управления свойствами в многокомпонентных системах.

Однако электронная и атомно-молекулярная структуры химических частиц в TlMS_2 изучены слабо [15]. Анализ влияния среды отжига на диффузию легирующих примесей в этих материалах скуден, и ряд вопросов, в частности связанных с диффузионными процессами, остался неизученным. Это может быть связано, в частности, с трудностями решения задач химической динамики, т.е. с изменениями во времени энергетических и структурных характеристик частиц таких систем. Параметры транспортных явлений позволяют улучшить характеристики и определить быстродействие приборов. К таким явлениям относятся диффузия частиц и протекание тока в материалах.

Кристаллическое соединение TlGaS_2 имеет несколько модификаций, в том числе моноклинную структуру (пространственная группа $C2/c$, № 15) [9]. TlGaS_2 может быть использован как фоточувствительный материал в фотонике, оптике, нано- и микроэлектронике [2, 5]. По данным дифференциально-термического анализа температура плавления TlGaS_2 составляет ~ 1170 К [8]. Соединение TlInS_2 также имеет несколько модификаций, в том числе моноклинную слоистую структуру ($C2/c$, № 15) [15].

Однако в известных работах по транспорту в TlMS_2 зависимость коэффициента диффузии от температуры осталась неучтенной. Это критично для полупроводниковых материалов в широком диапазоне рабочих температур и длительности облучения. В связи с вышеизложенным актуальным является исследование электронной структуры и диффузии частиц в низкоразмерных системах на основе TlMS_2 . Цель работы — первопринципный расчет структуры и молекулярно-динамическое (МД) моделирование коэффициента атомной диффузии вблизи температуры плавления TlMS_2 ($M = \text{Ga}, \text{In}$).

2. МОДЕЛЬ И МЕТОД РАСЧЕТА

В данном исследовании для квантово-механических расчетов использовался метод теории функционала плотности (DFT). Кристаллическая структура TlMS_2 (пространственная группа $C2/c$, № 15) была оптимизирована с использованием функционала в приближении обобщенного градиента (GGA) с помощью программы ATK [3, 4]. В качестве валентных электронных конфигураций использовались $\text{Tl} - [\text{Xe}] 4f^{14}5d^{10}6s^26p^1$, $\text{Ga} - [\text{Ar}] 3d^{10}4s^24p^1$, $\text{In} - [\text{Kr}] 4d^{10}5s^25p^1$ и $\text{S} - [\text{Ne}] 3s^23p^4$ соответственно. DFT-расчеты энергии суперъячеек

TlMS_2 проводились методом численного интегрирования путем генерации k -точек по зоне Бриллюэна с использованием метода Монкхорста — Пака. Релаксация параметров решетки и положений атомов кристалла проводилась до тех пор, пока силы, действующие между атомами, не стали менее 0.05 эВ/нм. Максимальное значение тензора механических напряжений в суперъячейке составляло ≤ 0.1 мэВ/Å³. Порог кинетической энергии 500 эВ достаточен для достижения сходимости. Сходимость электронного самосогласованного взаимодействия была получена при полной разности энергий менее 10^{-5} эВ.

Зонная структура электронных состояний и запрещенная зона TlMS_2 рассчитаны методом DFT GGA. Использовались функционалы GGA — PBE и GGA + U . Вклад обменной части обменно-корреляционного функционала в полную энергию системы с учетом спина d -орбиталей определялся как

$$E^{GGA+U} = E^{GGA} + \frac{U - J}{2} \sum_{\sigma} \left[\left(\sum_m n_{m,m}^{\sigma} \right) - \left(\sum_{m,m'} n_{m,m'}^{\sigma} n_{m',m}^{\sigma} \right) \right],$$

где U — кулоновский параметр; J — обменный параметр; $(U - J)$ — эффективный параметр взаимодействия; σ — индекс, относится к спину; n — матрица заполнения $3d$ -орбиталей с индексами; m — индекс d -орбиталей (квантовое число углового момента).

Кристаллическая структура TlMS_2 оптимизирована и рассчитана. Мы использовали два обменно-корреляционных функционала GGA — PBE и GGA + U со значением $U - J = 2.1$ эВ. Функционал GGA + U уменьшает рассчитанные параметры решетки на 0.003 Å и увеличивает ширину запрещенной зоны на 0.2 эВ.

Методом молекулярной динамики (МД) [1, 16, 17] решено уравнение движения отдельных типов (α -тип) атомов TlMS_2 , включая потенциалы взаимодействия, зависящие от координат атомов. Молекулярно-динамические расчеты проводились с использованием программы Lammps [18]. Нижний мономолекулярный слой TlGaS_2 был зафиксирован для предотвращения движения атомов α -типа и предотвращения выхода других атомов из бокса МД-моделирования. В боксе МД-моделирования нижний мономолекулярный слой TlMS_2 был зафиксирован, чтобы предотвратить движение атомов α -типа и предотвратить выход других атомов TlMS_2 из бокса. Моделирование проводилось с периодическими граничными условиями для вертикальных плоскостей на выбранном параллелепипеде TlMS_2 . Атомная система TlMS_2 описана как канонический ансамбль (NVT) [1]. В такой системе число атомов (N), объем (V) параллелепипеда TlMS_2 и температура T постоянны. Время

дискретизации МД-моделирования было выбрано равным 10 фемтосекунд (фс) для описания колебаний атомов в кристаллической решетке TlMS_2 с периодом более 50 фс. Шаг интегрирования ньютоновских уравнений движения равен 1–2 фс. Шаг интегрирования в жидком состоянии составлял 2 фс (шаг по времени = 0.002).

При МД-моделировании использовался потенциал, описывающий силовое поле молекулы TlMS_2 в твердой и жидкой фазах. Потенциал ван-дер-ваальсовых взаимодействий был выбран в виде потенциала Леннарда—Джонса (потенциал 6–12). То есть для атомных пар мы использовали следующую функциональную форму потенциала: $U(r) = \left(\frac{A}{r^{12}}\right) - \left(\frac{B}{r^6}\right)$, где A, B — параметры потенциала.

МД-моделирование использовалось для рассмотрения динамики системы с ансамблем NV . Энергия системы с ансамблем NV оставалась постоянной. Изначально температура была задана, и при заданном ансамбле она не увеличивается, а колеблется около заданного значения. Энергия системы сохраняется на протяжении всего процесса моделирования (от десяти до сотен тысяч временных шагов) в ансамбле NVT . Граничные условия параллелепипеда TlMS_2 и расчет электростатических (кулоновских) взаимодействий определены с точностью 10^{-6} .

Число атомов моделируемого соединения TlMS_2 в однофазном состоянии (твердом или жидком) составляло 8000 атомов, а в двухфазных состояниях (твердом и жидком) — 16000 атомов. МД-моделирование проводилось в диапазоне температур от 300 до 1175 К по схеме Верле [19].

Вблизи температуры плавления TlMS_2 ($T_m(\text{TlGaS}_2) = 1170 \text{ K}$ [8]; $T_m(\text{TlInS}_2) = 1040 \text{ K}$ [16]) предполагалось, что действует диффузионно-лимитирующий процесс и атомы (частицы) движутся упорядоченно. Кинетическая энергия системы TlMS_2 фиксировалась в ансамбле NVT . Изменение кинетической энергии системы аппроксимировалось перемасштабированием скоростей атомов на заданном временном шаге. Коэффициент пересчета скоростей (λ) атомов системы определялся по следующей формуле [16]:

$$\lambda = \sqrt{1 + \frac{\Delta t}{\tau_1} \left(\frac{T_0}{T \left(t - \frac{\Delta t}{2} \right)} - 1 \right)},$$

где τ_1 — постоянная времени порядка 1 пс.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. DFT-расчет TlGaS_2

При кристаллизации расплава стехиометрического состава 1 : 1 системы $\text{Tl}_2\text{S} - \text{Ga}_2\text{S}_3$ образуется соединение TlGaS_2 с моноклинной структурой и пространственной группой $C2/c$, 15 [8]. Кристаллическая ячейка соединения TlGaS_2 , оптимизированная методом DFT GGA-PBE, показана на рис. 1.

Элементарная ячейка моноклинной системы TlGaS_2 с пространственной группой $C2/c$ построена на трех векторах a, b и c . Они имеют разную длину, между ними два прямых и один косой угол. Параметры кристаллической решетки суперъячейки соединения TlGaS_2 , оптимизированные с использованием функционалов GGA-PBE и DFT GGA + U , мало (0.003 Å) отличаются друг от друга.

Рассчитанные методом DFT GGA-PBE параметры решетки TlGaS_2 ($a = 10.773 \text{ Å}$, $b = 10.773 \text{ Å}$, $c = 15.638 \text{ Å}$, $\alpha = \beta = 100.06^\circ$) согласуются с экспериментальными данными: $a = 10.2917 \text{ Å}$, $b = 10.2843 \text{ Å}$, $c = 15.1753 \text{ Å}$, $\alpha = \beta = 99.603^\circ$ [8, 9].

Правильная оценка запрещенной зоны E_g является проблемой при DFT-расчете фундаментальной щели. Для системы N электронов E_g определяется как разница между потенциалом ионизации (I) и сродством к электрону (A) системы: $E_g = I - A$. Это означает, что систему можно выразить как разницу между полными энергиями основного состояния, доступными для расчетов DFT. С другой стороны, ширина запрещенной зоны в DFT-формализме Кона—Шэма (KS) определяется как разность между собственными значениями минимума зоны проводимости (CBM) и максимума валентной зоны (VBM): $E_g^{\text{KS}} = \mu_{CBM} - \mu_{VBM}$. В рамках KS DFT эти две величины E_g и E_g^{KS} отличаются друг от друга разрывом производной: $E_g = E_g^{\text{KS}} + \Delta_{\text{XC}}$.

Обменно-корреляционные функционалы (Δ_{XC}), например, на основе LDA и GGA, зависят от электронной плотности и имеют разрыв производной,

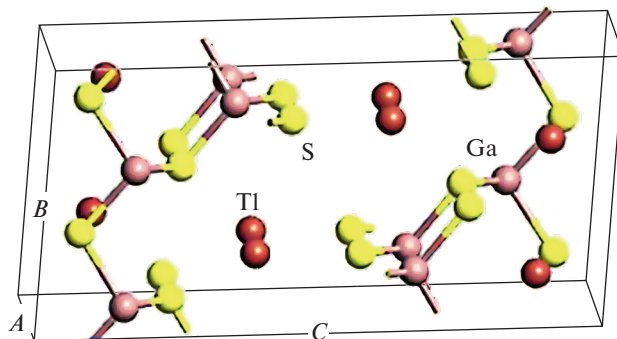


Рис. 1. Оптимизированная ячейка DFT GGA-PBE кристалла TlGaS_2 с моноклинной структурой.

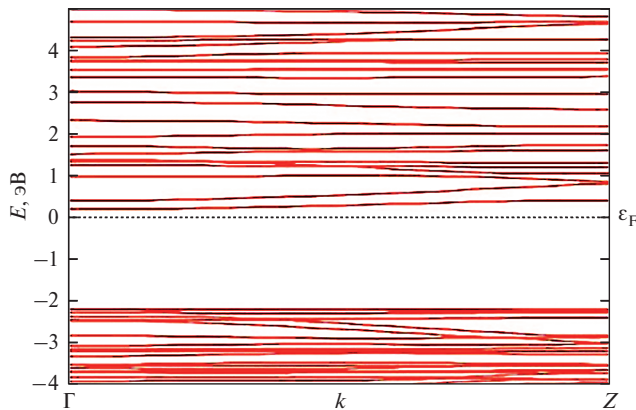


Рис. 2. Зонная структура соединения TiGaS_2 , рассчитанная методом DFT GGA-PBE. Состояния в области отрицательной энергии принадлежат валентной зоне, а состояния в области положительной энергии принадлежат зоне проводимости.

равный нулю для твердых тел [20]: $\Delta_{\text{XC}}^{\text{LDA,GGA}} = 0$. Это приводит к ошибкам в расчете ширины запрещенной зоны методом DFT при использовании этих приближений. Сложные функционалы, такие как гибридные GGA, учитывающие вклад орбиталей, позволяют исправить разрыв производной Δ_{XC} . В этом случае оценка запрещенной зоны включает различные вклады.

Нами исследовано влияние функционалов GGA-PBE [21, 22] и GGA + U [23] на значение E_g при DFT-расчете электронной запрещенной зоны TiGaS_2 . Функционалы GGA-PBE и GGA + U являются эффективными потенциалами для расчета методом DFT приблизительной запрещенной зоны TiGaS_2 .

Зонная структура соединения TiGaS_2 , рассчитанная с использованием функционалов GGA-PBE и GGA + U , незначительно меняется. Рассчитанное методом DFT GGA-PBE значение E_g соединения TiGaS_2 ($E_g = 2.37$ эВ) меньше по сравнению с экспериментальным значением $E_g = 2.62$ эВ (при 77 K [8]). Значение E_g TiGaS_2 , полученное методом DFT GGA-PBE, также на 0.2 эВ ниже значения E_g , полученного с использованием функционала GGA + U . На рис. 2 представлена зонная структура соединения TiGaS_2 , рассчитанная методом DFT GGA-PBE. В зоне Бриллюэна моноклинной решетки TiGaS_2 верх валентной зоны локализован в точке симметрии Γ , а низ зоны проводимости расположен вдоль линии симметрии $\Gamma - Y$.

Спектры электронной плотности состояний (DOS) содержат низкоэнергетические пики (вклад орбиталей Ga-3d при энергии –16 эВ; вклад орбиталей Ga-4s и S-4s при энергии –14 эВ; вклад Ti-5d-орбиталей при энергии –11 эВ, вклад Ti-6s-орбиталей при энергии –8 эВ. Верх валентной зоны

образован p -состояниями атомных орбиталей S-3p, Ga-4p и Ti-6p соответственно. Дно зоны проводимости формируется преимущественно в диапазоне энергий от 0.5 до 5 эВ за счет вклада орбитальных состояний незанятых p -состояний металлов (Ga-4p¹, Ti-6p¹).

3.2. Диффузионное МД-моделирование

При выращивании кристаллов, пленок и наноструктур тройных халькогенидных полупроводников из жидкости происходят различные химические и физические явления, например диффузия атомов металлов и халькогенов, а также химические реакции на границах фаз. Эти явления приводят к улучшению или ухудшению сформировавшихся структур. Изучение этих явлений необходимо для повышения эффективности управления свойствами материалов. Одним из способов изучения зависимости свойств от структуры материалов является метод молекулярной динамики. В МД, как известно, эволюцию во времени системы взаимодействующих атомов или частиц отслеживают путем интегрирования их уравнений движения.

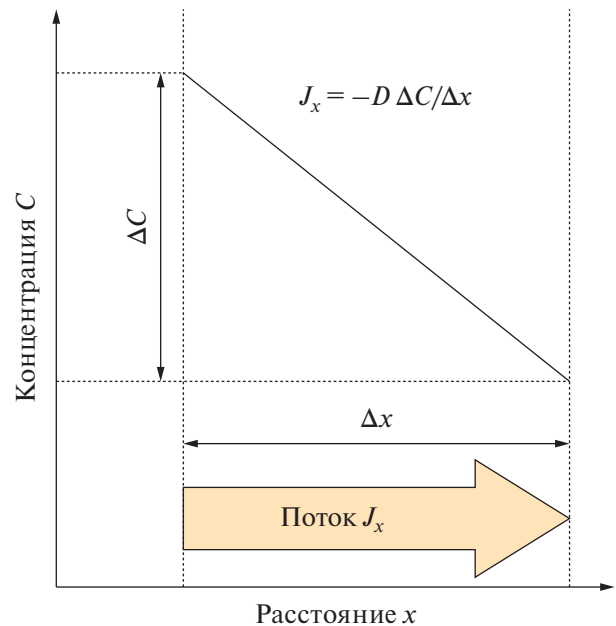


Рис. 3. Иллюстрация первого закона Фика. Частицами могут быть атомы, молекулы или структурные компоненты TiGaS_2 . Первый закон Фика для изотропной среды записывается как $J_x = -D(\partial C / \partial x)$, где J_x — поток частиц (диффузионный поток); C — плотность частиц (концентрация); D — коэффициент диффузии (или коэффициент пропорциональности) рассматриваемых типов частиц. Знак “минус” в этом уравнении указывает на противоположные направления диффузионного потока и градиента концентрации.

3.2.1. Диффузионная модель

Диффузия, как известно, представляет собой процесс, приводящий к выравниванию концентрации. При выборе модели диффузии будем рассматривать поток диффундирующих частиц в одном измерении (направление x), показанном на рис. 3.

Для определения коэффициентов диффузии отдельных атомов элементов тройного халькогенидного соединения TiGaS_2 использовались следующие приближения:

1. Коэффициенты диффузии не зависят от концентрации химических веществ.
2. Диффузия одномерна и градиенты концентрации химических веществ присутствуют только по толщине слоя химического соединения.
3. Жидкие пленки структурных единиц соединения рассматриваются как полубесконечные диффузионные системы химических веществ. Это условие означает, что часть каждого слоя остается незатронутой диффузией во время плавления соединения.
4. Диффузия является основным механизмом вблизи границы твердого тела и жидкости. Другие механизмы, такие как химические реакции и адсорбция, обычно действуют быстрее и не контролируют процессы.
5. Диффузия химических веществ происходит в однофазной системе.

Решение второго уравнения Фика

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

в случае бесконечных распределений по обе стороны границы раздела фаз химического соединения (при $x = 0$) становится дополнительной функцией ошибок расчета

$$C(x, t) = \left(\frac{C_0}{2} \right) \operatorname{erfc} \left[\frac{x}{2(Dt)^{0.5}} \right],$$

где D — коэффициент диффузии; C — концентрация диффундирующих частиц; C_0 — начальное значение C ; t — время диффузии.

3.2.2. МД-моделирование

При МД-моделировании интегрируется система связанных дифференциальных уравнений (уравнений Ньютона) [16, 24]

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_j F_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \sum_j \sum_k F_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) + \dots, \quad (1)$$

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i,$$

где m_i — масса атома i ; F_2 — силовая функция парного взаимодействия между атомами; F_3 — функция трехчастичного взаимодействия; $\mathbf{r}_i$ и $\mathbf{v}_i$ — векторы положения и скорости атома i .

Силовые члены являются производными энергетических выражений. В этих выражениях энергия атома i записана как функция положения его самого и других атомов.

При МД-моделировании удобно сохранить одно или несколько членов F_2 , F_3 в уравнении (1). Эти уравнения позволяют описать эволюцию системы во времени. В этом отношении МД-расчеты имеют преимущество перед ab initio-расчетами электронной структуры. МД-расчеты позволяют описать динамическое поведение атомной системы без решения уравнения Шредингера на каждом временном шаге.

В системе TiGaS_2 предполагалось, что химические частицы (атомы) типа α распространяются за счет диффузии. При хаотическом движении частиц их среднее квадратичное смещение (MSD) характеризует отклонение движения от исходного положения с течением времени. Траектория частицы MSD рассчитывается по уравнению

$$MSD = \langle \Delta \mathbf{r}_\alpha^2(t) \rangle \equiv \langle |\mathbf{r}_{i\alpha}(t) - \mathbf{r}_{i\alpha}(0)|^2 \rangle =$$

$$= \frac{1}{N_\alpha} \left\langle \sum_{i=1}^{N_\alpha} |\mathbf{r}_{i\alpha}(t) - \mathbf{r}_{i\alpha}(0)|^2 \right\rangle,$$

где $\mathbf{r}_{i\alpha}(t)$ — координата i -й частицы типа α ; N_α — общее число частиц типа α .

Предположим, что структура TiGaS_2 имеет трехмерную изотропную решетку, в которой частицы мигрируют скачками между соседними узлами. В такой решетке между соседними узлами будем считать, что расстояние равно $\mathbf{r}_\alpha$ и атомы α совершают n случайных скачков за время t . Тогда MSD частиц типа α будет равно $\mathbf{r}_\alpha^2(t) = na^2$.

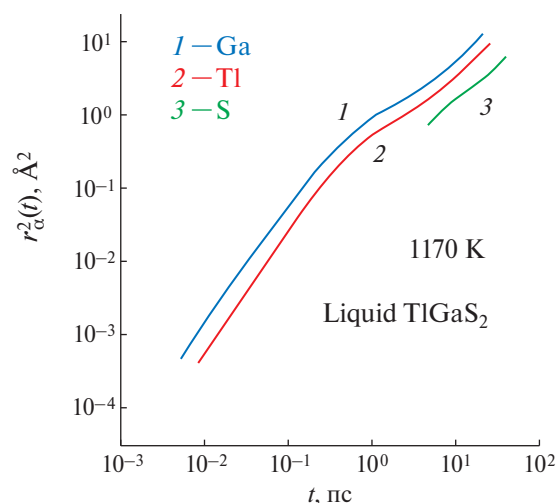


Рис. 4. МД-рассчитанная временная зависимость среднее квадратичного смещения атомов соединения TiGaS_2 в жидком состоянии при $T = 1170$ К. Нижняя прямая линия до точки перегиба соответствует диффузионному режиму.

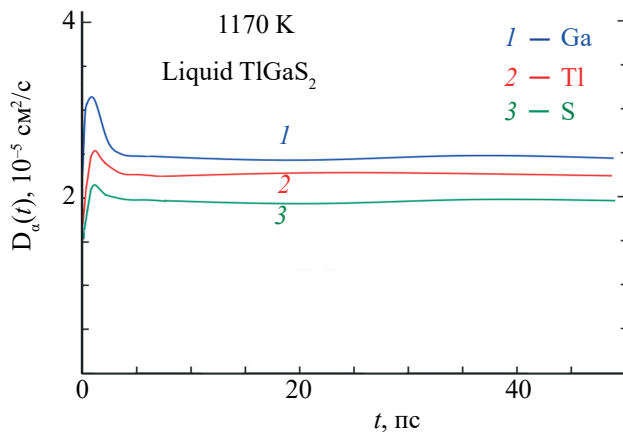


Рис. 5. MD-рассчитанная зависимость коэффициента диффузии атомов соединения TlGaS_2 в жидком состоянии ($T = 1170 \text{ K}$) с учетом среднеквадратичных смещений атомов в момент времени t .

Коэффициент диффузии сферической частицы можно определить по уравнению $D_\alpha = \frac{na^2}{6t}$. Отсюда для коэффициента диффузии атомов со случайными скачками получаем [16]:

$$D_\alpha = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle \Delta \mathbf{r}_\alpha^2(t) \rangle}{6t} = \frac{1}{6N_\alpha t} \left\langle \sum_{i=1}^{N_\alpha} |\mathbf{r}_{i\alpha}(t) - \mathbf{r}_{i\alpha}(0)|^2 \right\rangle. \quad (2)$$

Среднестатистическое число диффундирующих атомов системы TlGaS_2 с изотропной решеткой зависит от времени диффузии. В изотропной системе последовательные скачки атомов независимы друг от друга и атомы релаксируют сравнительно длительное время. Затем они мигрируют из одного узла решетки в соседний узел. Точность МД-расчетов коэффициента диффузии атомов такой системы повышается за счет использования относительно больших выборок атомов и времени диффузии.

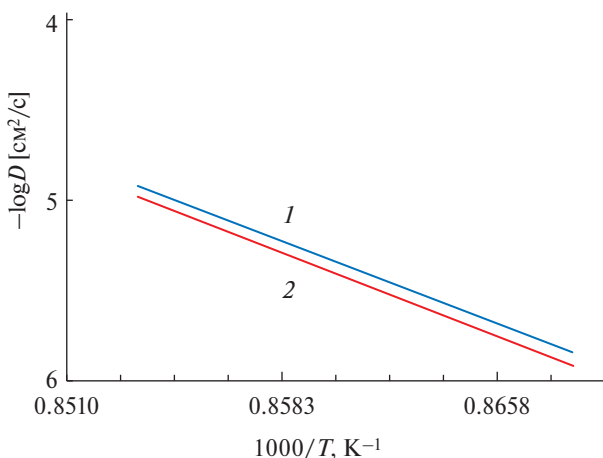


Рис. 6. Температурная зависимость рассчитанного коэффициента диффузии атомов TlGaS_2 : 1 — галлий; 2 — таллий.

В расчетах предполагалось, что движение атомов системы происходит в так называемом диффузионном режиме и его скорость определяется только диффузией атомов типа α и других атомов TlGaS_2 через слой жидкости. В приближении локальной нейтральности диффузию такого атома можно описать уравнением (2). Результаты расчетов MSD атомов соединения TlGaS_2 в жидком состоянии представлены на рис. 4.

MD-рассчитанная временная зависимость коэффициента диффузии атомов в соединении TlGaS_2 в жидком состоянии приведена на рис. 5.

Значения плато зависимости $D_\alpha(t)$ на рис. 5 достигаются через 4 пс. Вычисленные коэффициенты диффузии атомов TlGaS_2 вблизи температуры плавления (1170 K) составляют: $D_{\text{Tl}} = 2.3 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{c}$, $D_{\text{Ga}} = 2.5 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{c}$ и $D_{\text{S}} = 2.1 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{c}$.

С учетом результатов МД-моделирования коэффициента диффузии атомов TlGaS_2 в интервале 1150–1175 K построили зависимость $D_\alpha = f(1/T)$ (рис. 6); она описывается законом Аррениуса

$$D_\alpha(T) = D_0 \exp(-E_a / k_B T),$$

где D_0 — предэкспоненциальный множитель; E_a — макроскопическая энергия активации; k_B — постоянная Больцмана.

Энергия активации диффузии для атомов α -типа, рассчитанная по этой зависимости, составляет 0.113 эВ (для атомов галлия) и 0.115 эВ (для атомов таллия) в жидком состоянии TlGaS_2 соответственно.

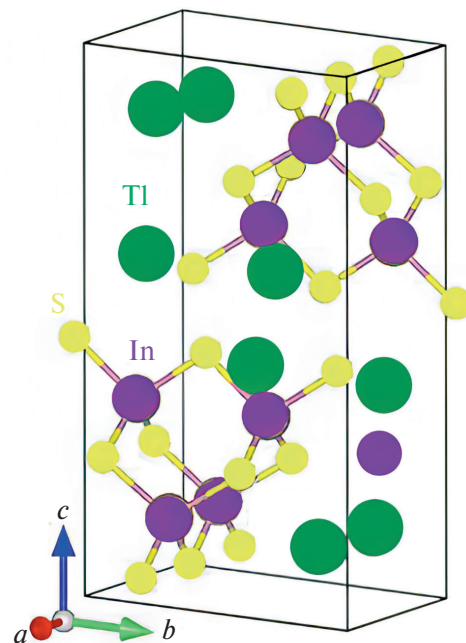


Рис. 7. Прimitives ячейка кристалла TlInS_2 с моноклинной структурой.

3.3. DFT-расчет TlInS_2

Представленная на рис. 7 элементарная ячейка TlInS_2 моноклинной системы построена на трех векторах a , b и c , имеющих разную длину с двумя прямыми и одним непрямым углами между ними.

Параметры кристаллической решетки TlInS_2 DFT GGA-PBE, рассчитанные нами, согласуются с экспериментальными данными: $a = 10.942 \text{ \AA}$, $b = 10.484 \text{ \AA}$, $c = 15.606 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = 100.6^\circ$ [8, 15]. Вычисленные параметры решетки TlInS_2 составляют: $a = 11.147 \text{ \AA}$, $b = 11.159 \text{ \AA}$, $c = 15.378 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = 96.883^\circ$.

3.4. Диффузионное MD-моделирование TlInS_2

Результаты расчетов среднеквадратического смещения атомов α -типа соединения TlInS_2 в жидком состоянии представлены на рис. 8.

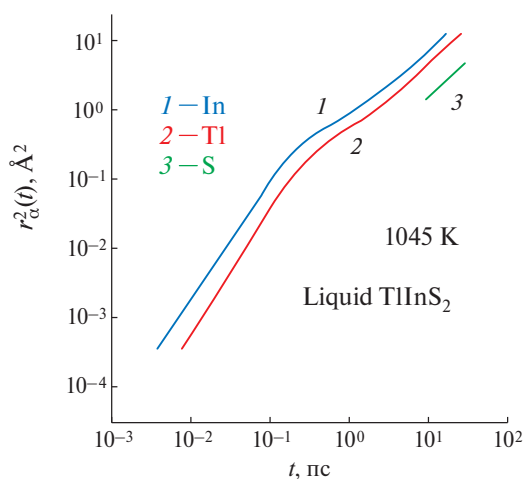


Рис. 8. Теоретическая зависимость среднеквадратического смещения атомов α -типа соединения TlInS_2 от времени в жидком состоянии при $T = 1045 \text{ K}$. Нижняя прямая линия до точки перегиба соответствует диффузионному режиму.

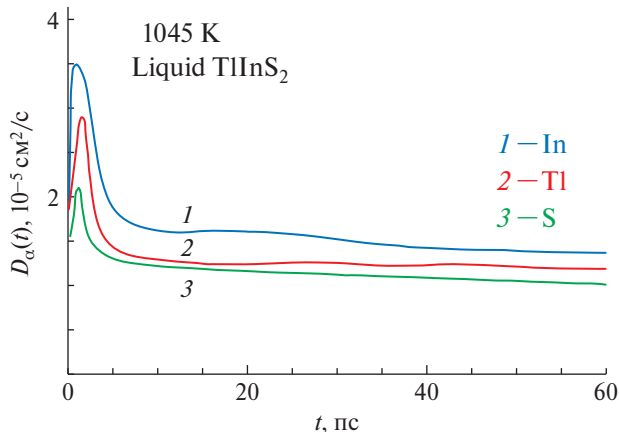


Рис. 9. Вычисленные методом MD коэффициенты диффузии атомов α -типа соединения TlInS_2 в жидком состоянии с учетом среднеквадратических смещений в момент времени t ; $T = 1045 \text{ K}$.

Зависимость коэффициента диффузии атомов в жидком соединении TlInS_2 от времени по данным MD-расчетов представлена на рис. 9.

Значения плато на рис. 9 достигаются через 4 пс и дают коэффициенты диффузии атомов TlInS_2 в жидком состоянии порядка $10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$. Эта величина характерна для полупроводников при высоких температурах. Вблизи температуры плавления ($T_m = 1045 \text{ K}$) соединения TlInS_2 расчетные значения D_α для отдельных атомов составляют: $D_{\text{Tl}} = 2.610^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$, $D_{\text{In}} = 2.510^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$ и $D_{\text{S}} = 2.110^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$. Значения E_a для отдельных типов атомов соединения TlInS_2 , рассчитанные в жидком состоянии ($T_m = 1040\text{--}1050 \text{ K}$) по зависимости Аррениуса, составляют: 0.117 эВ (для атомов галлия) и 0.111 эВ (для атомов индия) соответственно.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

ВЫВОДЫ

Использование функционала GGA + U в расчетах DFT несколько уменьшает параметры решетки и увеличивает ширину запрещенной зоны TlMS_2 ($M = \text{Ga, In}$) по сравнению с экспериментальными данными. Параметры решетки соединений TlMS_2 , рассчитанные методом DFT GGA-PBE, согласуются с экспериментальными данными.

Из расчетов DFT GGA-PBE зонной структуры TlGaS_2 следует, что верх валентной зоны образован p -состояниями атомных орбиталей $\text{S-}3p^4$, $\text{Ga-}4p^1$ и $\text{Tl-}6p^1$ соответственно. Дно зоны проводимости формируется за счет вкладов орбиталей незанятых p -состояний $\text{Ga-}4p^1$ и $\text{Tl-}6p^1$ при энергиях от 0.5 до 5 эВ. Верх валентной зоны формируется за счет вкладов атомных орбиталей p -состояний $\text{S-}3p^4$, $\text{Ga-}4p^1$ и $\text{Tl-}6p^1$ соответственно. Прямая запрещенная зона между дном зоны проводимости и верхом валентной зоны составляет 2.37 эВ. Это значение близко к экспериментальным данным при низких температурах: 2.62 эВ при 77 K.

В приближении локальной нейтральности моделировали диффузию атомов в тройных соединениях TlMS_2 ($M = \text{Ga, In}$). Молекулярное динамическое (МД) моделирование коэффициента диффузии (D_α) атомов соединения TlGaS_2 показывает, что температурная зависимость D_α вблизи температуры плавления TlGaS_2 ($T_m = 1170 \text{ K}$) подчиняется закону Аррениуса. МД-рассчитанные значения D_α в жидком состоянии TlGaS_2 составляют: $D_{\text{Tl}} = 2.310^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$, $D_{\text{Ga}} = 2.510^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$ и $D_{\text{S}} = 2.110^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$ при $T_m = 1170 \text{ K}$. Энергия активации диффузии атомов TlGaS_2 , рассчитанная из зависимости $D_\alpha = f(1/T)$ при

1150–1175 К составляет 0.113 для атомов Ga и 0.115 эВ для атомов Tl соответственно. Рассчитанные коэффициенты диффузии атомов вблизи температуры плавления ($T_m = 1045$ К) соединения TlInS_2 , полученные методом МД, для отдельных атомов составляют: $D_{\text{Tl}} = 2.610^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$, $D_{\text{In}} = 2.510^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$ и $D_{\text{S}} = 2.110^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$. Энергия активации атомов TlInS_2 , рассчитанная в жидком состоянии ($T_m = 1040\text{--}1050$ К), составляет: 0.117 эВ (для атомов галлия) и 0.111 эВ (для атомов индия) соответственно.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Allen M.P., Tildesley D.J. Computer Simulation of Liquids (2nd edn). Oxford University Press. UK 626, 2017. ISBN: 9780198803195.
- Cicek Z., Yakut S., Deger D., Bozoglu D., Mustafaeva S. Thickness dependence of dielectric properties of TlGaS_2 thin films // Materials Science in Semiconductor Processing. 2023. V. 166. P. 107733. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2023.107733>
- Mustafaeva S.N., Asadov M.M., Guseynova S.S., Dzhabarov A.I., Lukichev V.F. Electronic, dielectric properties and charge transfer in a TlGaS_2 : Nd^{3+} single crystal at direct and alternating current // Physics of the Solid State. 2022. V. 64. № 4. P. 426–433. <https://doi.org/10.21883/PSS.2022.04.53497.251>
- Mustafaeva S.N., Asadov M.M., Huseynova S.S., Hasanov N.Z., Lukichev V.F. Ab initio calculations of electronic properties, frequency dispersion of dielectric coefficients and the edge of the optical absorption of TlInS_2 : Sn single crystals // Physics of the Solid State. 2022. V. 64. № 6. P. 617–627. <https://doi.org/10.21883/PSS.2022.06.53823.299>
- Asadov S.M., Mustafaeva S.N., Lukichev V.F. Modifying the Dielectric Properties of the TlGaS_2 Single Crystal by Electron Irradiation // Russian Microelectronics. 2020. V. 49. № 4. P. 263–268. <https://doi.org/10.1134/S1063739720040022>
- Nemerenco L., Syrbu N.N., Dorogan V., Bejan N.P., Zalamai V.V. Optical spectra of TlGaS_2 crystals // Journal of Luminescence. 2016. V. 172. P. 111–117. <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2015.12.001>
- Hussein S.A., Bahabri F.S., Al-Orainy R.H., Shoker F., Al-Gohtany S.A., Al-Garni S.E. Thermoelectric Characterization of Thallium Gallium Disulphide, TlGaS_2 // Journal of King Abdulaziz University. Sci. 2013. V. 25. № 1. P. 3–14. <https://doi.org/10.4197/Sci.25-1.1>
- Mustafaeva S.N., Asadov M.M., Kyazimov S.B., Gasanov N.Z. T-x phase diagram of the $\text{TlGaS}_2\text{--TiFeS}_2$ system and band gap of $\text{TlGa}_{1-x}\text{Fe}_x\text{S}_2$ ($0 \leq x \leq 0.01$) single crystals // Inorganic Materials. 2012. V. 48. № 10. P. 984–986. <https://doi.org/10.1134/s0020168512090117>
- Delgado G.E., Mora A.J., Pérez F.V., González J. Crystal structure of the ternary semiconductor compound thallium gallium sulfide, TlGaS_2 // Physica B. 2007. V. 391. № 2. P. 385–388. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2006.10.030>
- Kashida S., Yanadori Y., Otaki Y., Seki Y., Panich A.M. Electronic structure of ternary thallium chalcogenide compounds // Physica status solidi. (a). 2006. V. 203. № 11. P. 2666–2669. <https://doi.org/10.1002/pssa.200669598>
- Ashraf I.M. Photophysical Properties of TlGaS_2 Layered Single Crystals // The Journal of Physical Chemistry. B. 2004. V. 108. № 30. P. 10765–10769. <https://doi.org/10.1021/jp0311411>
- Allakhverdiev K.R. Two-photon absorption in layered TlGaSe_2 , TlInS_2 , TlGaS_2 and GaSe crystals // Solid State Communications. 1999. V. 111. № 5. P. 253–257. [https://doi.org/10.1016/s0038-1098\(99\)00202-1](https://doi.org/10.1016/s0038-1098(99)00202-1)
- Qasrawi A.F., Gasanly N.M. Optoelectronic and electrical properties of TlGaS_2 single crystal // Physica status solidi. (a). 2005. V. 202. № 13. P. 2501–2507. <https://doi.org/10.1002/pssa.200521190>
- Yukse N.S., Gasanly N.M., Aydinli A., Ozkan H., Acikgoz M. Infrared photoluminescence from TlGaS_2 layered single crystals // Crystal Research and Technology. 2004. V. 39. № 9. P. 800–806. <https://doi.org/10.1002/crat.200310256>
- Asadov S.M., Mustafaeva S.N., Huseynova S.S. Simulation of the growth of a $\text{TlInS}_2\text{<Yb>}$ single crystal, DFT calculation of electronic properties, and ac conductivity of samples // Fizika. 2023. Section C. P. 47–52.
- Asadov S.M. Molecular Dynamics Modeling of a Ternary Semiconductor Compound in A Liquid State // The Journal of Physical Chemistry. 2023. V. 1. № 1. P. 01–08. <https://cskscientificpress.com>
- Roccatano D. A Short Introduction to the Molecular Dynamics Simulation of Nanomaterials. In book: M.J. Jackson, W. Ahmed (eds.) Micro and Nanomanufacturing. Volume II. Chapter 6. Springer International Publishing AG. 2018. P. 123–154. https://doi.org/10.1007/978-3-319-67132-1_6
- Lammps. <http://lammps.sandia.gov/>. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator.
- Verlet L. Computer “Experiments” on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard–Jones Molecules // Physical Review. 1967. V. 159. P. 98–103. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.159.98>
- Görling A. Exchange–correlation potentials with proper discontinuities for physically meaningful kohn–sham eigenvalues and band structures // Physical Review. B. 2015. V. 91. P. 245120–10. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.245120>
- Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple // Physical Review Letters. 1996. V. 77. № 18. P. 3865–3868. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
- Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Erratum: generalized gradient approximation made simple // [Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. P. 3865]. Physical Review Letters. 1997. V. 78. № 7. P. 1396–1396. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.78.1396>
- Asadov M.M., Mustafaeva S.N., Guseynova S.S., Lukichev V.F. Ab initio calculations of electronic properties and charge transfer in $\text{Zn}_{1-x}\text{Cu}_x\text{O}$ with wurtzite structure // Physics of the Solid State. 2022. V. 64. № 5. P. 526–533. <https://doi.org/10.21883/PSS.2022.05.54011.27>
- Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // Journal of Computational Physics. 1995. V. 117. № 1. P. 1–19. <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>

MODELING THE DIFFUSION OF ATOMS IN MULTICOMPONENT SEMICONDUCTORS IN A DISORDERED STATE

© 2024 S. M. Asadov^{1, 2, *}

¹Scientific Research Institute of Geotechnological Problems of Oil, Gas and Chemistry,
Azerbaijan State Oil and Industry University, Baku, Azerbaijan

²Nagiyev Institute of Catalysis and Inorganic Chemistry,
Ministry of Science and Education of Azerbaijan, Baku, Azerbaijan

*E-mail: salim7777@gmail.com

Density functional theory (DFT) using the generalized gradient approximation (GGA) made it possible to optimize the crystal structure, calculate the lattice parameters and band structure of TIMS_2 ($M = \text{Ga}, \text{In}$) semiconductor compounds with a monoclinic structure (space group $C2/c$, No. 15). DFT calculations of the structure of compounds were expanded using two exchange-correlation functionals GGA-PBE and GGA + U (U is the Coulomb parameter) with a value of $U - J = 2.1$ eV (effective interaction parameter). Thermal diffusion coefficients (D_α) of atoms of individual types (α), i.e. atoms of thallium, gallium, indium and sulfur near the melting point of the compound were calculated by the molecular dynamics (MD) method. The values of atoms were obtained in the local neutrality approximation using the canonical MD ensemble. The values of the atoms were corrected to take into account the root-mean-square displacements of the atoms at a given time and temperature. The dependences $D_\alpha = f(1/T)$ of atoms, described by the Arrhenius law, were constructed. The activation energy of atomic diffusion was calculated.

Keywords: semiconductor ternary compounds, layered structure, TlGaS_2 and TlInS_2 , DFT GGA, molecular dynamics, canonical MD ensemble, diffusion coefficient, liquid state

REFERENCES

1. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer Simulation of Liquids (2nd edn). Oxford University Press. UK 626, 2017. ISBN: 9780198803195.
2. Cicek Z., Yakut S., Deger D., Bozoglu D., Mustafaeva S. Thickness dependence of dielectric properties of TlGaS_2 thin films // Materials Science in Semiconductor Processing. 2023. V. 166. P. 107733. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2023.107733>
3. Mustafaeva S.N., Asadov M.M., Guseinova S.S., Dzhabarov A.I., Lukichev V.F. Electronic, dielectric properties and charge transfer in a TlGaS_2 : Nd^{3+} single crystal at direct and alternating current // Physics of the Solid State. 2022. V. 64. No. 4. P. 426–433. <https://doi.org/10.21883/PSS.2022.04.53497.251>
4. Mustafaeva S.N., Asadov M.M., Huseynova S.S., Hasanov N.Z., Lukichev V.F. Ab initio calculations of electronic properties, frequency dispersion of dielectric coefficients and the edge of the optical absorption of TlInS_2 : Sn single crystals // Physics of the Solid State. 2022. V. 64. No. 6. P. 617–627. <https://doi.org/10.21883/PSS.2022.06.53823.299>
5. Asadov S.M., Mustafaeva S.N., Lukichev V.F. Modifying the Dielectric Properties of the TlGaS_2 Single Crystal by Electron Irradiation // Russian Microelectronics. 2020. V. 49. No. 4. P. 263–268. <https://doi.org/10.1134/S1063739720040022>
6. Nemerenco L., Syrbu N.N., Dorogan V., Bejan N.P., Zalamai V.V. Optical spectra of TlGaS_2 crystals // Journal of Luminescence. 2016. V. 172. P. 111–117. <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2015.12.001>
7. Hussein S.A., Bahabri F.S., Al-Orainy R.H., Shoker F., Al-Gohtany S.A., Al-Garni S.E. Thermoelectric Characterization of Thallium Gallium Disulphide, TlGaS_2 // Journal of King Abdulaziz University. Sci. 2013. V. 25. No. 1. P. 3–14. <https://doi.org/10.4197/Sci.25-1.1>
8. Mustafaeva S.N., Asadov M.M., Kyazimov S.B., Gasanov N.Z. T-x phase diagram of the TlGaS_2 – TlFeS_2 system and band gap of $\text{TlGa}_{1-x}\text{Fe}_x\text{S}_2$ ($0 \leq x \leq 0.01$) single crystals // Inorganic Materials. 2012. V. 48. No. 10. P. 984–986. <https://doi.org/10.1134/s0020168512090117>
9. Delgado G.E., Mora A.J., Pérez F.V., González J. Crystal structure of the ternary semiconductor compound thallium gallium sulfide, TlGaS_2 // Physica B. 2007. V. 391. No. 2. P. 385–388. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2006.10.030>
10. Kashida S., Yanadori Y., Otaki Y., Seki Y., Panich A.M. Electronic structure of ternary thallium chalcogenide compounds // Physica status solidi. (a). 2006. V. 203. No. 11. P. 2666–2669. <https://doi.org/10.1002/pssa.200669598>
11. Ashraf I.M. Photophysical Properties of TlGaS_2 Layered Single Crystals // The Journal of Physical Chemistry. B. 2004. V. 108. No. 30. P. 10765–10769. <https://doi.org/10.1021/jp0311411>
12. Allakhverdiev K.R. Two-photon absorption in layered TlGaSe_2 , TlInS_2 , TlGaS_2 and GaSe crystals // Solid State Communications. 1999. V. 111. No. 5. P. 253–257. [https://doi.org/10.1016/s0038-1098\(99\)00202-1](https://doi.org/10.1016/s0038-1098(99)00202-1)
13. Qasrawi A.F., Gasanly N.M. Optoelectronic and electrical properties of TlGaS_2 single crystal // Physica status solidi. (a). 2005. V. 202. No. 13. P. 2501–2507. <https://doi.org/10.1002/pssa.200521190>

14. *Yukse N.S., Gasanly N.M., Aydinli A., Ozkan H., Acikgoz M.* Infrared photoluminescence from TiGaS_2 layered single crystals // *Crystal Research and Technology*. 2004. V. 39. No. 9. P. 800–806.
<https://doi.org/10.1002/crat.200310256>
15. *Asadov S.M., Mustafaeva S.N., Huseynova S.S.* Simulation of the growth of a $\text{TiInS}_2<\text{Yb}>$ single crystal, DFT calculation of electronic properties, and ac conductivity of samples // *Fizika*. 2023. Section C. P. 47–52.
16. *Asadov S.M.* Molecular Dynamics Modeling of a Ternary Semiconductor Compound in A Liquid State // *The Journal of Physical Chemistry*. 2023. V. 1. No. 1. P. 01–08.
<https://cskscientificpress.com>
17. *Roccatano D.* A Short Introduction to the Molecular Dynamics Simulation of Nanomaterials. In book: M. J. Jackson, W. Ahmed (eds.). *Micro and Nanomanufacturing*. Volume II. Chapter 6. Springer International Publishing AG. 2018. P. 123–154.
https://doi.org/10.1007/978-3-319-67132-1_6
18. Lammmps. <http://lammmps.sandia.gov/>. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator.
19. *Verlet L.* Computer “Experiments” on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard—Jones Molecules // *Physical Review*. 1967. V. 159. P. 98–103.
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.159.98>
20. *Görling A.* Exchange-correlation potentials with proper discontinuities for physically meaningful kohn-sham eigenvalues and band structures // *Physical Review. B*. 2015. V. 91. P. 245120–10.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.245120>
21. *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* Generalized gradient approximation made simple // *Physical Review Letters*. 1996. V. 77. No. 18. P. 3865–3868.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
22. *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* Erratum: generalized gradient approximation made simple // [Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. P. 3865]. *Physical Review Letters*. 1997. V. 78. No. 7. P. 1396–1396.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.78.1396>
23. *Asadov M.M., Mustafaeva S.N., Guseinova S.S., Lukichev V.F.* Ab initio calculations of electronic properties and charge transfer in $\text{Zn}_{1-x}\text{Cu}_x\text{O}$ with wurtzite structure // *Physics of the Solid State*. 2022. V. 64. No. 5. P. 526–533.
<https://doi.org/10.21883/PSS.2022.05.54011.27>
24. *Plimpton S.* Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // *Journal of Computational Physics*. 1995. V. 117. No. 1. P. 1–19.
<https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ДЛЯ РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ ПОВЕРХНОСТНЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН И УСТРОЙСТВ НА ИХ ОСНОВЕ

© 2024 г. А. С. Койгеров

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет “ЛЭТИ” им. В.И. Ульянова (Ленина),
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: a.koigerov@gmail.com

Поступила в редакцию 07.02.2024 г.

После доработки 12.02.2024 г.

Принята к публикации 12.02.2024 г.

Описывается ряд моделей на основе метода конечных элементов (МКЭ) для анализа параметров поверхностных акустических волн (ПАВ) и устройств на их основе. В обобщенной форме излагается компьютерный метод формирования моделей в программе COMSOL Multiphysics. Описывается и графически иллюстрируется работа в трех основных решателях в среде COMSOL: стационарный режим, область собственных частот, частотная область. Проведен анализ свойств волн Рэлея и вытекающих ПАВ. Представлена визуализация ряда характеристик. Рассмотрен анализ таких параметров как фазовая скорость волны, коэффициент электромеханической связи, статическая емкость преобразователя. В примерах рассмотрены эквидистантный преобразователь, преобразователь с расщепленными электродами и однонаправленный преобразователь типа DART. Предложены способы анализа гармоник на ПАВ и волноводного эффекта. Показано, что модель справедлива как для монокристаллических подложек, так и для слоистых структур. Рассмотрен анализ температурного коэффициента частоты для таких структур, как TCSAW и I.N.P.SAW. Представлена модель для расчета амплитудно-частотных характеристик устройств. Показано, что данные, полученные в результате численного анализа, соответствуют экспериментальным данным и известным литературным источникам.

Ключевые слова: акустоэлектроника, поверхностные акустические волны, встречно-штыревой преобразователь, фильтр на ПАВ, метод конечных элементов, COMSOL, TCSAW, I.N.P., гармоника ПАВ

DOI: 10.31857/S0544126924020036

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время устройства на ПАВ [1, 2] (фильтры, линии задержки, резонаторы и т.д.) находят широкое применение в различной аппаратуре систем связи и радиолокации. Также они используются в качестве чувствительных элементов сенсоров — датчиков физических величин (температура, влажность, микроперемещение и т.д.) [3–5]. Широкое распространение устройства на ПАВ получили в диапазоне от десятков мегагерц до 2.5–3.0 ГГц. Область технических применений устройств на ПАВ постоянно развивается благодаря как общей тенденции миниатюризации сложных электронных систем, так и уникальным свойствам акустических волн.

Актуальность исследования и разработки новых приборов на ПАВ обусловлена возрастающей потребностью в таких элементах для модернизации и создания новых систем связи. Современные системы передачи информации на радиочастоте

постоянно развиваются, появляется все больше и больше новых беспроводных сервисов и протоколов обмена данными, поэтому возникает потребность в различных полосах пропускания и несущих частотах. С ростом объема и скорости передаваемой информации необходимо обеспечивать для решения многих задач расширение относительной полосы пропускания. При этом происходит “уплотнение” частотного спектра в радиоканале и появляется потребность в крутых скачках амплитудно-частотных характеристик (АЧХ). Эти и другие задачи постоянно требуют появления новых номиналов фильтров на ПАВ, зачастую с требованиями по электрическим параметрам, которые приближаются к предельно возможным вообще для данного класса устройств [6].

Несмотря на то что такие технологии, как FBAR (free-standing bulk acoustic resonator) и цифровая обработка сигналов составляют серьезную конкуренцию и сокращают рынок устройств на ПАВ, развитие в области достижения предельных

и критических параметров для устройств на ПАВ позволяют выдерживать конкуренцию в некоторых направлениях [6]. Для иллюстрации важности и актуальности в новых приборах с предельно возможными для своего класса параметрами приведем несколько характерных примеров применения приборов на ПАВ.

Например, рассмотрим применение фильтров на ПАВ в составе приемников систем связи с аналого-цифровым преобразователем (АЦП). При современном уровне технологии большинство радиоприемников и передатчиков могут быть реализованы в цифровой форме. В максимальном приближении цифровой части приемника к антенне кроется множество преимуществ. Фактически размещение АЦП на входе высокочастотной части и выполнение непосредственной дискретизации на радиочастоте или на промежуточной частоте могут показаться привлекательными, однако имеют несколько серьезных недостатков (в частности, в вопросе чувствительности и внеполосного подавления) [7]. Поэтому между антенной и АЦП необходим аналоговый фильтр — преселектор, который будет выполнять ряд задач:

- включать в себя антиэлайсинговый фильтр (фильтр помех наложения, возникающих при последующем аналого-цифровом преобразовании сигнала);

- расширять динамический диапазон и повышать чувствительность приемника за счет ограничения полосы пропускания, поскольку существует проблема, что если на вход приемника поступает очень сильный сигнал, он перегружает приемник и невозможно принимать слабые сигналы. Нередко бывает, что сильным сигналом может оказаться помеха в соседнем частотном канале. И, если за счет преселектора сузить рабочую полосу частот, то тем самым можно увеличить и динамический диапазон приемника.

Второй пример, который можно привести, это работа с сигналами, имеющими квадратурную амплитудную модуляцию (Quadrature Amplitude Modulation — QAM), применение которой позволяет более эффективно использовать выделенные рабочие полосы частот или осуществлять передачу большего объема данных в более узком спектре. Воздействие помех в радиоканале приводит к возникновению неконтролируемых изменений амплитуды и фазы, что отражается как “размазывание” точек фазы на диаграмме состояний и будет вызывать рост бит-ошибок и ухудшение качества связи. К такому же роду искажений приводит и наличие фильтров с большой неравномерностью группового времени задержки (ГВЗ) и АЧХ в полосе пропускания. А с помощью технологии ПАВ можно проектировать фильтры с относительно малым значением неравномерности АЧХ и ГВЗ и быть конкурентоспособными с другими технологиями.

В качестве третьего примера отметим, что несущая частота во многих связанных системах часто преобразуется в более высокую частоту с помощью различных конверторов и смесителей. Если гетеродин, используемый в системе переноса частоты, имеет большую нестабильность, то его фазовый шум может маскировать полезный сигнал, что будет отрицательно сказываться на соотношении сигнал-шум и, в конечном счете, ограничивать чувствительность и избирательность системы [8]. Поэтому актуальной является и работа над генераторами на резонаторах на ПАВ [9, 10], которые позволяют получать характеристики с малыми фазовыми шумами в совокупности с малыми габаритными размерами.

Постоянные улучшения в характеристиках устройств ПАВ и стремление достичь предельно возможных параметров является необходимым условием для опережения технических достижений конкурирующих технологий [6].

На основе анализа общих тенденций развития и задачи выдерживать конкуренцию со стороны других технологий ясно, что требуется не только усовершенствование распространенных топологических решений на ПАВ, но и разработка и исследование новых конструкций приборов на ПАВ, способных достигать предельных и критических параметров. А разработка приборов с уникальными характеристиками требует привлечения современных подходов и программ по моделированию.

В настоящее время метод конечных элементов (МКЭ) является эффективным инструментом для моделирования различных физических процессов в твердых телах. Развитие современной вычислительной техники и появление современных пакетов моделирования позволяют анализировать эти процессы и разрабатывать устройства без изготовления промежуточного физического прототипа. Для создания модели можно использовать различные пакеты мультифизического моделирования, такие как COMSOL Multiphysics (далее — COMSOL) и ANSYS. Данные пакеты успешно решают различные прикладные задачи в области разработки устройств микросистемной техники, акустических микросистем и микроприборов акустоэлектроники.

Рассмотренные в рамках настоящей работы подходы и возможности COMSOL Multiphysics могут быть использованы для решения прикладных задач по расчету рабочих характеристик приборов на ПАВ, а также для анализа волновых акустических процессов в пьезоэлектрических подложках и слоистых структурах.

2. МЕТОД КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ
В COMSOL

Для расчета различного рода акустических задач вполне подходит COMSOL. В его состав входит несколько важных решателей, позволяющих производить необходимые расчеты. Отличительной чертой устройств на ПАВ является тесная связь процессов из нескольких областей физики: механики и электростатики. По этой причине для математического описания динамики ПАВ используются уравнения в частных производных. COMSOL с помощью встроенных функций решает системы дифференциальных уравнений, связывающие упругие, пьезоэлектрические и диэлектрические свойства среды распространения ПАВ.

Уравнения пьезоакустики в тензорной форме [11]:

$$\begin{cases} T_{ij} = C_{ijkl}S_{kl} - e_{kij}E_k; \\ D_i = \epsilon_{ij}E_j + e_{ijk}S_{jk}, \end{cases}$$

где T, S — тензоры напряжений и деформаций; E, D — векторы напряженности и индукции электрического поля; C, e, ϵ — тензоры модулей упругости, пьезомодулей и диэлектрической проницаемости соответственно.

Также уравнения можно представить в следующем виде [11]:

$$\begin{cases} \rho \frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2} = C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_k} + e_{kij} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i \partial x_k}; \\ e_{ikl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_l} - \epsilon_{ik} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i \partial x_k} = 0, \quad i, j, k, l = 1, 2, 3, \end{cases}$$

где показана связь компонента механического смещения u в декартовой системе координат x и электрического потенциала Φ ; ρ — плотность материала.

При расчете в программном пакете для каждого узла выбранной сетки ищется четыре неизвестных — три механических компонента смещения (u_1, u_2, u_3) и Φ — электрический потенциал. При условии задания соответствующих начальных и граничных условий данные уравнения полностью определяют возможные волновые процессы в объеме упругого анизотропного тела, обладающего пьезоэлектрическими свойствами [12].

С учетом особенностей геометрии полноапертурных ПАВ-устройств для расчета с помощью МКЭ требуются большие вычислительные мощности.

Как правило, полноапертурные модели устройств на ПАВ для их решения содержат сотни тысяч переменных и требуют значительных компьютерных ресурсов. В результате модели, описывающие топологию устройств в целом, главным образом больше подходят для анализа параметров готовых изделий, заменяя эксперимент на качественное мультифизическое моделирование, нежели для их проектирования и синтеза. Синтез и расчет лучше осуществлять на основе феноменологических или аналитических моделей (например, модели связанных мод (МСМ) или ряде дискретных моделей) [13, 14], но данные параметры брать из COMSOL из простых усеченных моделей или моделей пониженного порядка (МПП). Преимуществом такого подхода перед работой с полной МКЭ-моделью устройства является, во-первых, возможность существенно упростить модель устройства на ПАВ, снизить на порядок и более число переменных и число степеней свободы, а во-вторых, возможность извлечь необходимые параметры для более быстрых моделей на основе МСМ и т.д.

Отобразим ряд основных возможностей COMSOL по анализу волновых акустических процессов и расчету устройств на ПАВ (табл. 1).

Таблица 1. Области применения COMSOL для анализа и расчета ПАВ

Решатель	Применение
Собственная частота (Eigenfrequency)	Анализ параметров ПАВ на пьезоэлектрической подложке и слоистой структуре (скорость, коэффициент электромеханической связи (КЭМС), ТКЧ) Анализ гармоник ПАВ Анализ волноводного эффекта для 3D-ячеек
Стационарный (Stationary)	Статическая емкость Распределение заряда Диэлектрическая проницаемость
Частотная область (Frequency Domain)	Расчет Y-параметров ($Y_{11}, Y_{21}, Y_{12}, Y_{22}$) и S-параметров ($S_{11}, S_{21}, S_{12}, S_{22}$) фильтров, ЛЗ и резонаторов Анализ Y_{11} тестовых периодических ячеек (“Harmonic Admittance”) и извлечение параметров: область генерации объемных акустических волн (ОАВ), Q-фактор, КЭМС
Временной режим (Time Dependent)	Анализ параметров ПАВ (скорость, поляризация, отдельные компоненты механического смещения) Импульсная характеристика устройства

Из таблицы видно, что COMSOL позволяет работать с четырьмя типами решателей. Каждый из них подходит для решения определенного круга задач. Стоит отметить, что при переходе от модели полно апертурного устройства к МПП появляется возможность работы уже не только в 3D, но и в 2D. При переходе к 2D идет пренебрежение такими эффектами “второго порядка”, как дифракция и волноводный эффект, а также игнорируется влияние шин и контактных площадок и т.д. Тем не менее многие из этих эффектов можно анализировать отдельно и уже добавлять в быстрые аналитические модели в виде дополнительных модулей.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

3.1. Анализ собственных частот периодических ячеек

В COMSOL расчет собственных частот осуществляется с помощью решателя “Study — Eigenfrequency”. С помощью данного решателя удобно и эффективно можно анализировать параметры ПАВ как для различных типов встречно-штыревых преобразователей (ВШП) (рис. 1, а—в), так и для свободной и металлизированной

поверхности. В качестве тестовой структуры удобно рассматривать МПП в виде ячейки, размер которой составляет одну длину волны. Принцип перехода от ВШП с конечной апертурой и длиной в несколько периодов к МПП в одну длину волны показан на рис. 1, г. Глубина анализируемой поверхности составляет 5 длин волн. Граничные условия заданы таким образом, что данная структура рассматривается как бесконечная и периодическая. На нижнем торце подложки расположен идеально согласованный слой (рис. 2, а), поглощающий исходящие волны для ограничения области численного моделирования. Поскольку ПАВ распространяется в поверхностном слое глубиной примерно в несколько длин волн, то при построении сетки область у поверхности должна иметь более плотную сетку, например 20 элементов на длину волны, для остальной части предложено использовать менее плотную сетку — 10 элементов на длину волны (рис. 2, б).

В результате расчета наблюдаем набор собственных частот. Пример картины механических смещений для волны Рэлея и ВПАВ представлен на рис. 2, в, г соответственно. При этом в отсутствие

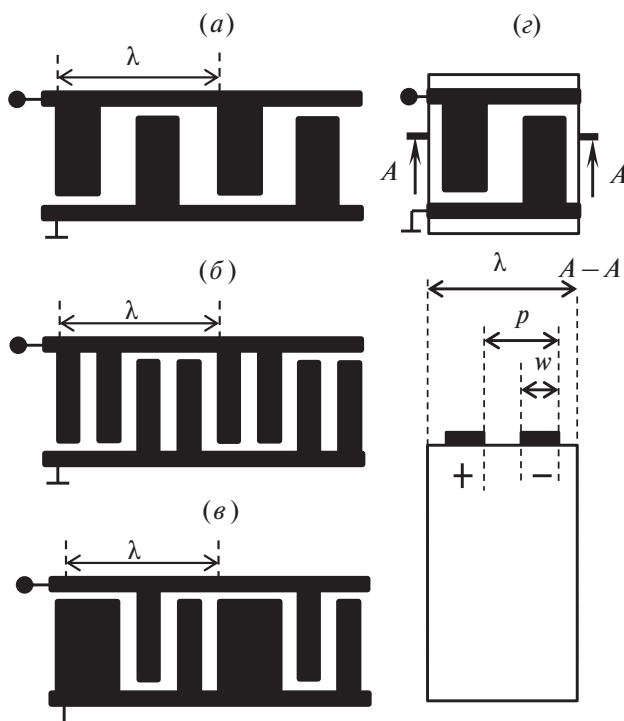


Рис. 1. Рассматриваемые ВШП в работе: а — эквидистантный с электродами шириной $\lambda/4$; б — с расщепленными электродами шириной $\lambda/8$; в — однонаправленный типа DART; г — принцип перехода к МПП. Обозначения: λ — длина волны; p — период следования электродов; w — ширина электрода.

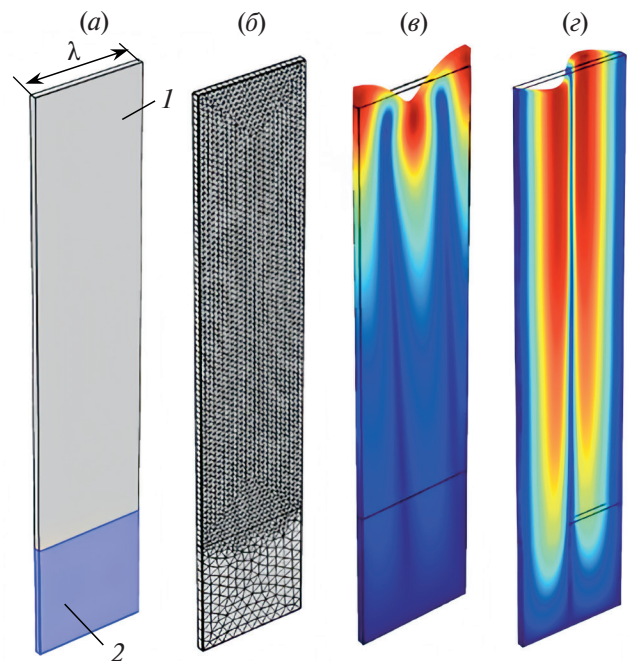


Рис. 2. Тестовые ячейки для монокристаллических пьезоэлектрических подложек: а — свободная поверхность; б — пример сетки; в — картина механических смещений волны Рэлея для подложки $128^\circ Y - X LiNbO_3$ для одной из собственных частот; г — картина механических смещений для ВПАВ для $36^\circ Y - X LiTaO_3$ для одной из собственных частот. Особенности модели: 1 — пьезоэлектрический кристалл; 2 — идеально согласованный слой; λ — длина волны.

электродов существует одна собственная частота, которая позволяет рассчитать фазовую скорость ПАВ V , а в присутствии электродов — две собственные частоты, зная которые, можно вычислить фазовую скорость и коэффициент отражения [15, 16].

На основе полученного набора собственных частот (f_1 и f_2) можно рассчитать параметры ПАВ, используя следующие формулы [12]:

$$V = \frac{f_1 + f_2}{2} \lambda;$$

$$r = \pi \frac{f_2 - f_1}{f_2 + f_1}.$$

По известным скоростям для свободной (V_0) и металлизированной (V_m) поверхности (при $H_m/\lambda \rightarrow 0$) можно оценить КЭМС как

$$K^2 = 2 \frac{V_0 - V_m}{V_0}.$$

3.2. Анализ периодических ячеек в частотной области

Еще одним эффективным способом анализа периодических ячеек является расчет проводимости в заданном частотном диапазоне с помощью решателя “Study — Frequency Response”. Такую проводимость в литературе называют “гармонический адмиттанс” и определяют как отношение тока к напряжению, когда гармоническое возбуждение применяется к бесконечной периодической структуре [17].

Анализ графика полной проводимости периодической тестовой структуры на примере подложки $36^\circ Y - X LiNbO_3$ (рис. 3) показывает, что в подложке одновременно возбуждается одновременно несколько акустических мод. Основной модой

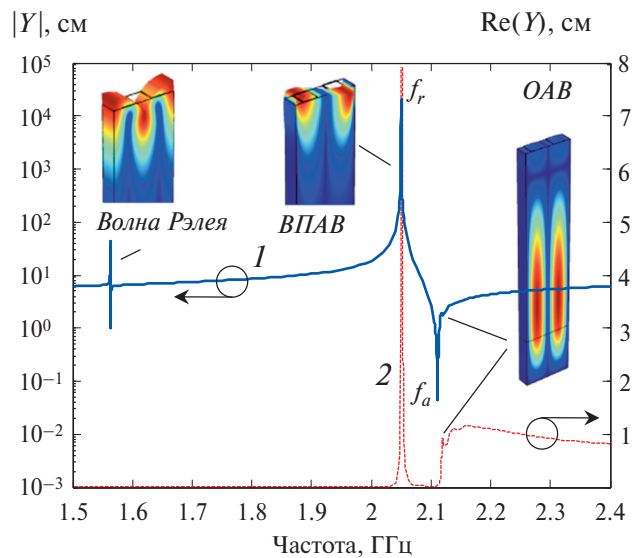


Рис. 3. Адмиттанс и картины механических смещений для тестовой электродной структуры на подложке $36^\circ Y - X LiTaO_3$.

в данном случае является ВПАВ, но в левой части присутствует менее выраженная волна Рэлея, а в правой части — излучение ОАВ. Излучение ОАВ ярко видно на вещественной части проводимости ($Re(Y)$). В данном случае все дополнительные моды могут вносить искажения в частотную характеристику устройства, работа которого рассчитана на основную акустическую волну.

Проводимость тестовой ячейки позволяет определить эффективный КЭМС. Для этого необходимо определить частоты резонанса (последовательный резонанс — f_r) и антирезонанса (параллельный резонанс — f_a) для выбранной акустической моды,

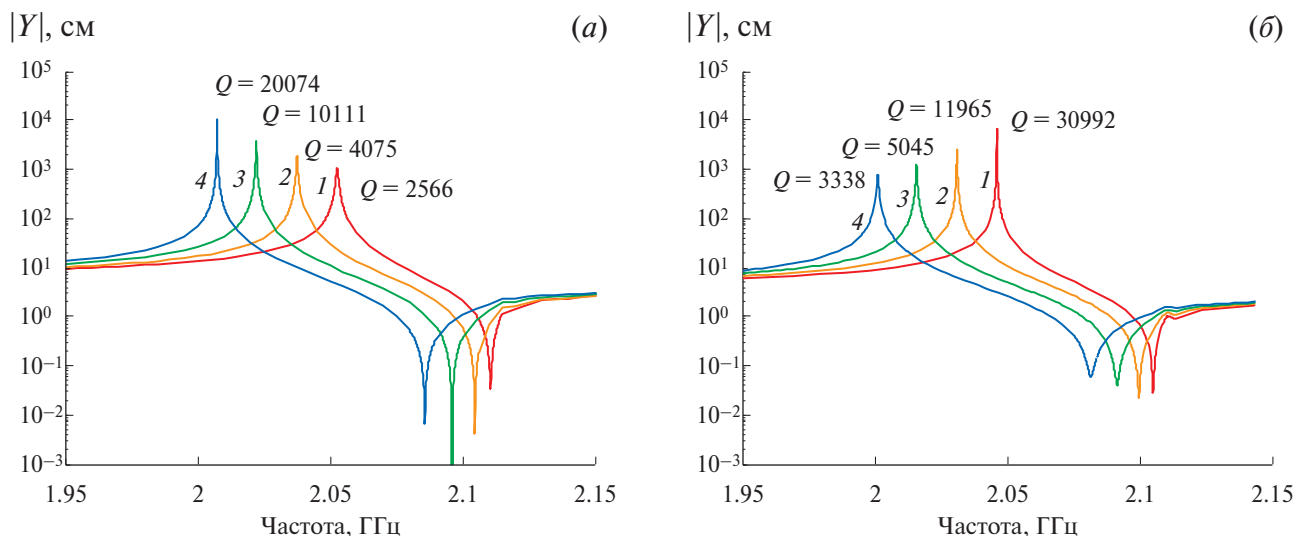


Рис. 4. Адмиттанс для тестовых электродных структур с периодом $p = \lambda / 2$ для различных толщин металлизации отношений h / λ на подложках: а — $36^\circ Y - X LiTaO_3$; б — $42^\circ Y - X LiTaO_3$; h / λ : 1 — 1%; 2 — 3%; 3 — 5%; 4 — 7%.

в нашем случае это ВПАВ, тогда эффективный КЭМС (K^2) вычисляется как [12]

$$K^2 = \frac{\pi f_r / (2f_a)}{\operatorname{tg}(\pi f_r / (2f_a))}.$$

Процесс распространения ВПАВ сопровождается утечкой или рассеиванием волны в глубину подложки. По анализу резонансного пика характеристики проводимости (рис. 4) добротность определяется как

$$Q = f_r / \Delta f_{-3\text{dB}},$$

где f_r — резонансная частота; $\Delta f_{-3\text{dB}}$ — полоса характеристики по уровню -3 dB .

На рис. 4, а, б приведены рассчитанные значения добротностей в зависимости от относительной толщины металлизации для $36^\circ Y-X\text{LiTaO}_3$ и $42^\circ Y-X\text{LiTaO}_3$. Полученные значения хорошо согласуются с данными из работы [18], где говорится, что на более толстых металлических пленках минимальная утечка на $42^\circ Y-X\text{LiTaO}_3$, а $36^\circ Y-X\text{LiTaO}_3$ более эффективен для меньших толщин металлизации.

3.3. Статический анализ периодических ячеек

Статический анализ (решатель “Study — Stationary”) удобен для расчета численного значения статической емкости электродов (погонной емкости). Для анализируемой тестовой ячейки необходимо задать потенциалы, под которыми находятся электроды (в нашем случае потенциал $+1\text{ В}$ и нулевой потенциал, или “земля”).

После расчета можно наблюдать картину распределения потенциала по глубине подложки и на ее поверхности. Результат статического анализа для однонаправленного преобразователя типа DART в виде распределения поверхностного потенциала представлен на рис. 5. Встроенными средствами COMSOL позволяет вывести численное значение статической емкости для анализируемой тестовой ячейки. Так, для расщепленных электродов ($\lambda/8$) статическая емкость на подложке $128^\circ Y-X\text{LiNbO}_3$ составляет $C_1 = 698.9\text{ пФ/м}$, для преобразователя

Таблица 2. Сравнение статической емкости для различных типов преобразователя

Тип преобразователя	Нормированная статическая емкость (расчет)	Нормированная статическая емкость (источник)
Электроды $\lambda/4$	1	1
Расщепленные электроды $\lambda/8$	1.42	1.41 [19]
Однонаправленный DART	1.22	1.21 [19]

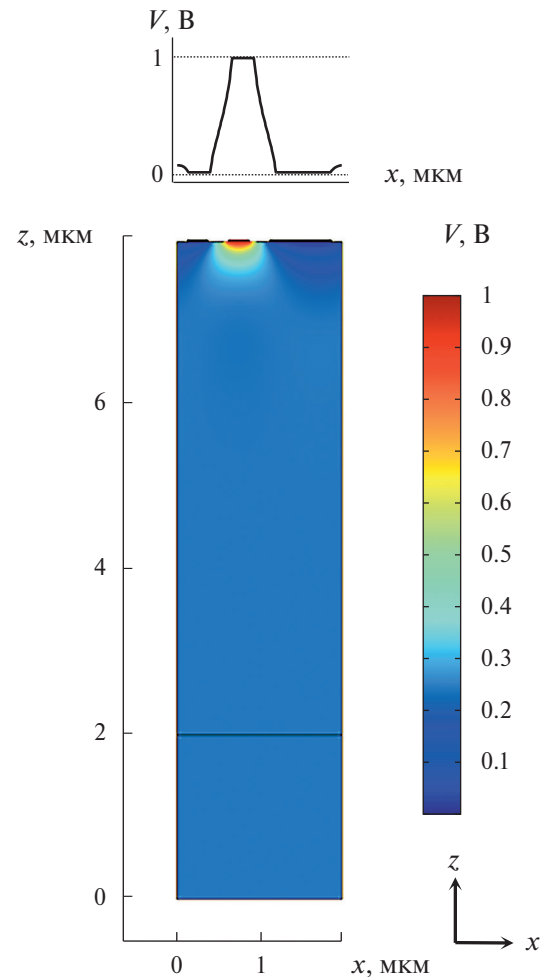


Рис. 5. Результат статического анализа для однонаправленного преобразователя типа DART в виде распределения поверхностного потенциала.

с электродами $\lambda/4$ емкость пары $C_0 = 492.2\text{ пФ/м}$, а для преобразователя типа DART $C_2 = 600.5\text{ пФ/м}$. Отношения $C_1/C_0 = 1.42$ и $C_2/C_0 = 1.22$, что соответствует известным теоретическим и экспериментальным данным [19]. Результаты сведены в табл. 2. Сравнение с известными источниками позволяет сделать вывод об эффективности данного типа анализа. Небольшую разницу можно объяснить конечной толщиной и профилем электродов. Для материалов с низкой эффективной диэлектрической проницаемостью (различные срезы кварца ($\epsilon \approx 4.5-5.5$)) необходимо учитывать и добавлять в расчет воздушный слой ($\epsilon = 1$) над электродами.

3.4. Анализ гармоник

На генерацию гармоник в устройствах на ПАВ влияют различные факторы, например топологические особенности конструкции, такие как коэффициент металлизации (отношение ширины электрода a к шагу электродов ВШП p : a/p), толщина металлизации и тип преобразователя. Пример

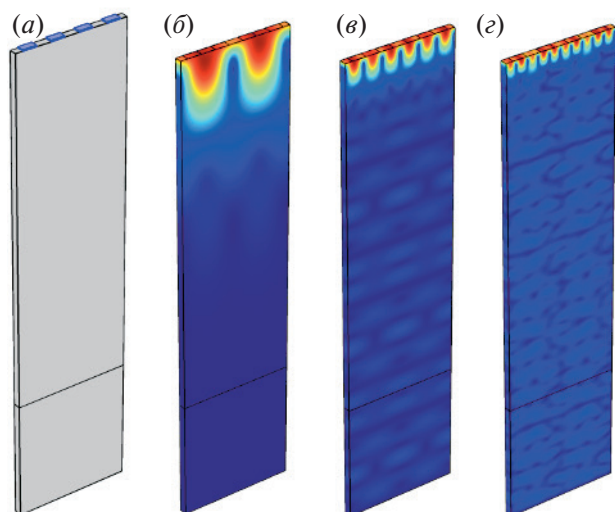


Рис. 6. Тестовая электродная ячейка для подложки $128^\circ Y-X \text{ LiNbO}_3$ с периодом $p = \lambda / 4$ и шириной электрода $\lambda / 8$ для анализа в области собственных частот и картины механических смещений волны Рэлея: *a* — геометрия ячейки; *b* — основная гармоника; *c* — 3-я гармоника; *d* — 5-я гармоника.

анализируемых с помощью пакета тестовых структур представлен на рис. 6, это периодические электродные структуры с периодом $p = \lambda / 4$ и шириной электродов $a = \lambda / 8$. Размер ячейки составляет одну длины волны (принято $\lambda = 2$ мкм). Пример отображения собственных частот для основной, 3-й и 5-й гармоник представлен на рис. 6. Методика извлечения параметров высших гармоник тождественна

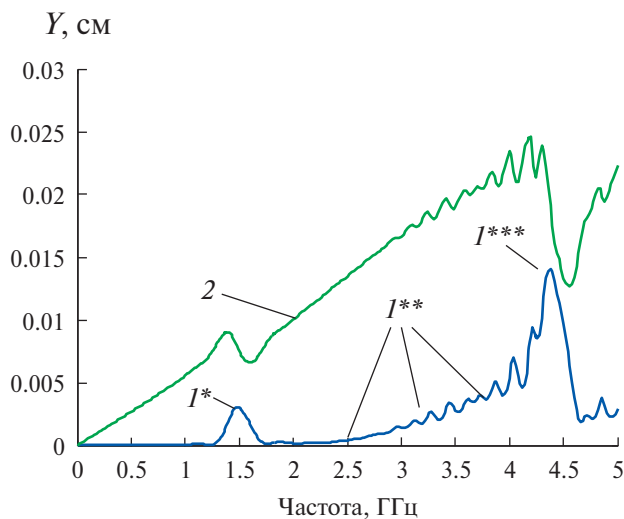


Рис. 7. Результат расчета проводимости (Y_{11}) преобразователя для подложки $128^\circ Y-X \text{ LiNbO}_3$ с периодом $p = \lambda / 4$ и шириной электрода $\lambda / 8$ (анализ в частотной области): 1 — реальная часть проводимости; 2 — мнимая часть проводимости; * — основная гармоника; ** — паразитные ОАВ; *** — 3-я гармоника.

методике для основной гармоника и описана в разделе 2. Кроме того, для более детального изучения свойств проводимости можно рассмотреть проводимость ограниченного числа пар электродов для уточнения параметров возбуждения как самой гармоника, так и вклада ОАВ (рис. 7).

3.5. Анализ слоистых структур на примере $\text{AlN}/\text{Al}_2\text{O}_3$

Использование вместо пьезоэлектрических монокристаллических подложек слоистых структур на основе пьезоэлектрических пленок позволяет использовать акустические волны с большой скоростью распространения, что дает возможность при тех же требованиях к разрешающей способности технологического оборудования получить большие рабочие частоты. В этом разделе представлены результаты теоретического исследования распространения ПАВ на структуре $\text{AlN}/\text{алмаз}$, в том числе КЭМС как для волн Рэлея, так и для волн Сезава (рис. 8). Теоретические расчеты показывают, что высокие скорости ПАВ достижимы при хорошей эффективности электромеханической связи (рис. 9). В соответствующих условиях расчет показывает большой КЭМС (до 1.6%), сравнимый с наблюдаемыми в относительно сильных пьезоэлектрических монокристаллах, но со скоростями ПАВ примерно

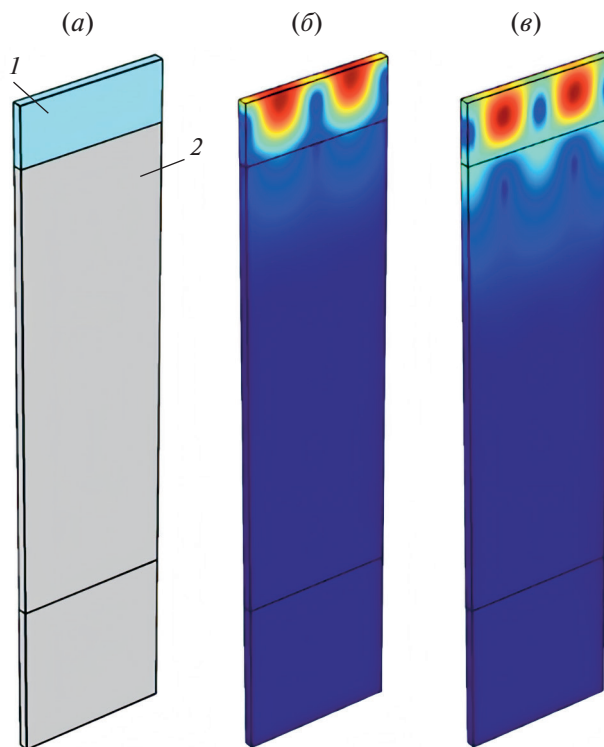


Рис. 8. Тестовая ячейка для слоистой структуры $\text{AlN}/\text{алмаз}$: *a* — геометрия ячейки; *b* — картина механических смещений волны Рэлея; *c* — картина механических смещений волны Сезава. Особенности модели: 1 — пьезоэлектрическая пленка нитрида алюминия; 2 — подложка из алмаза.

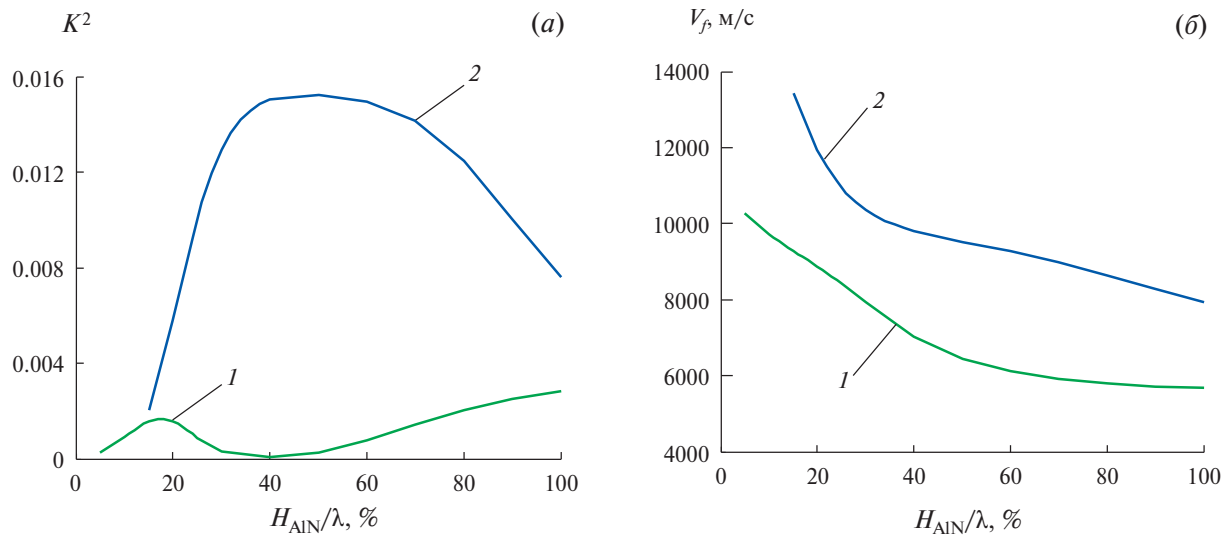


Рис. 9. Зависимость фазовой скорости (а) акустических волн и КЭМС (б) от толщины пленки нитрида алюминия: 1 — волна Рэлея; 2 — волна Сезава.

в 2 раза выше. Сравнение с данными из литературы [20], в том числе и с экспериментальными, показало хорошее совпадение между экспериментальными результатами и теоретическими расчетами, что демонстрируют потенциальную возможность создания устройств SAW на основе этой технологии.

3.6. Анализ ТКЧ материала на примере слоистых структур TC-SAW и I.H.P. SAW

Изменение температуры окружающей среды приводит к «уходу» частоты фильтров на ПАВ. Температурная стабильность, желательная для всех устройств на ПАВ, для ряда применений является необходимой, например для полосовых фильтров систем

мобильной связи, осуществляющих частотную фильтрацию в условиях перенасыщенного частотного спектра. Поэтому анализ различных пьезоэлектрических кристаллов и поиск решений по улучшению их термостабильных свойств для практического применения устройств акустоэлектроники актуальны и сегодня.

Популярные способы улучшения температурной стабильности [21–23]:

— TC-SAW (temperature compensated surface acoustic wave) [22] — нанесение пленки диоксида кремния (SiO_2) на монокристаллическую подложку (рис. 10, б);

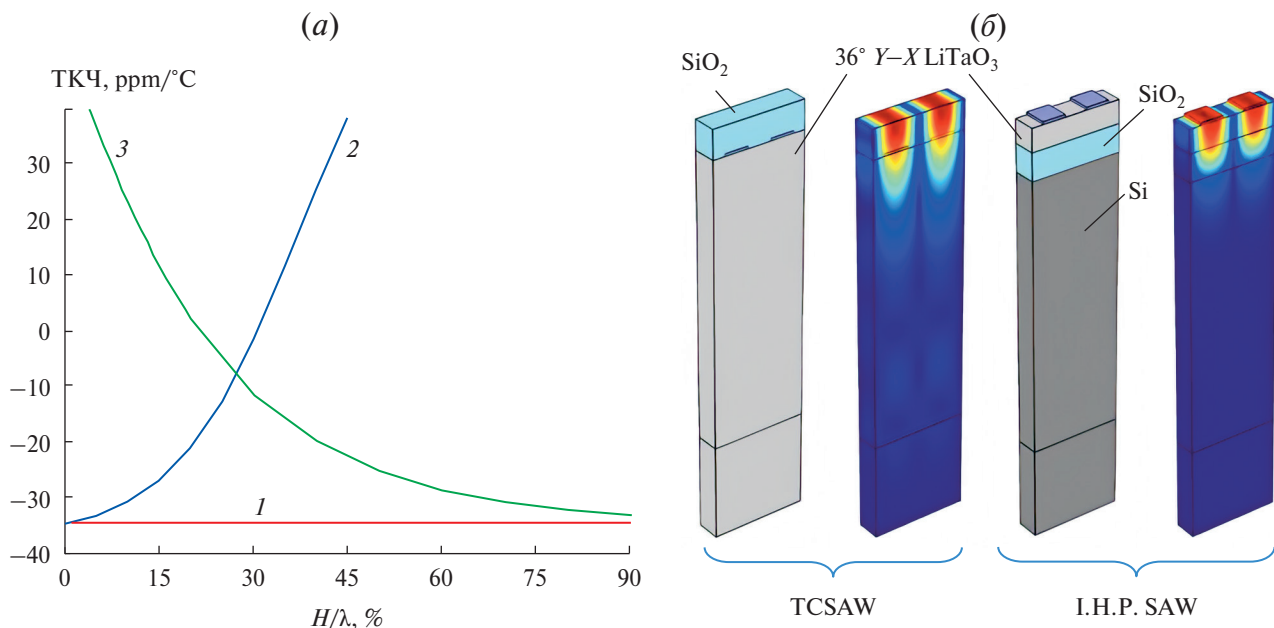


Рис. 10. ТКЧ: 1 — традиционная монокристаллическая подложка $36^\circ \text{Y-X LiTaO}_3$; 2 — зависимость от толщины пленки SiO_2 для структуры TC-SAW; 3 — зависимость от толщины слоя пьезоэлектрического материала $36^\circ \text{Y-X LiTaO}_3$ при постоянной толщине пленки $H_{\text{SiO}_2} = 30\%$ для структуры I.H.P.

— I.H.P. SAW (incredible high-performance SAW) [23] — “устройства с превосходными характеристиками”, в основе которых лежит использование многослойной структуры с применением пленки диоксида кремния и тонкого слоя пьезоэлектрического материала на дополнительной подложке для локализации волны и минимизации утечки волны в глубину подложки (см. рис. 10, б).

Однако нанесение пленки и использование слоистых структур сопряжено с изменением условий распространения акустических волн и изменением всех важнейших параметров ПАВ, которые необходимо контролировать и знать при проектировании устройств.

На рис. 10, а показана зависимость ТКЧ от параметров подложки и пленки SiO_2 двух технологий температурной компенсации в сравнении с традиционной подложкой без температурной компенсации на примере танталата лития 36 УХ. Для технологии TCSAW наблюдается уменьшение значения ТКЧ с ростом относительной толщины пленки SiO_2 и требуется значение толщины пленки $H_{\text{SiO}_2} / \lambda \approx 30\%$ для получения ТКЧ = 0, что хорошо согласуется с данными из работы [22]. Варьируя толщину пленки и толщину слоя пьезоэлектрического материала, можно также подобрать такое соотношение для технологии I.H.P. SAW, где будет наблюдаться ТКЧ = 0. Эта технология намного сложнее, но плюсом является то, что помимо минимизации ТКЧ наблюдается локализация волны в слое, тем самым уменьшается утечка волны в объем подложки и в фильтре на ПАВ потенциально достигается меньшее вносимое затухание. Проводя анализ в области собственных частот для

простых тестовых ячеек (см. рис. 10, б) можно проанализировать все интересующие параметры акустических волн и ТКЧ слоистой структуры.

3.7. Анализ волноводных мод

Типовая топология фильтра на поперечно-связанных резонаторах с ее характерными акустическими модами и типовая АЧХ представлены на рис. 11, а. Теория возбуждения волноводных мод на ПАВ изложена в работе [24]. Одновременное существование основных мод: симметричной моды S_0 и антисимметричной моды S_1 обеспечивает узкополосную АЧХ фильтра. Ширина полосы пропускания данного типа фильтров зависит от разницы скоростей этих мод. Моды более высших порядков лежат вне полосы пропускания, их эффективность возбуждения и скорости определяют вид полосы заграждения. Контроль параметров акустических мод на стадии моделирования позволяет точно прогнозировать АЧХ фильтра. Параметры данных волноводных акустических можно рассчитать численно с помощью теории собственных частот. Для этого потребуется перейти от бесконечной периодической ячейки к ячейке с конечной апертурой каждой резонаторной секции (рис. 11, б). Размер ячейки составляет одну длины волны. Глубина анализируемой поверхности составляет несколько длин волн. Граничные условия заданы таким образом, что данная структура рассматривается как периодическая решетка металлических электродов. По торцам и снизу подложки расположен идеально согласованный слой, поглощающий исходящие волны для ограничения области численного моделирования. Материал электродов — алюминий. Подложка — пьезоэлектрический материал, кварц 36 УХ-среза. Апертура, ширина центральной

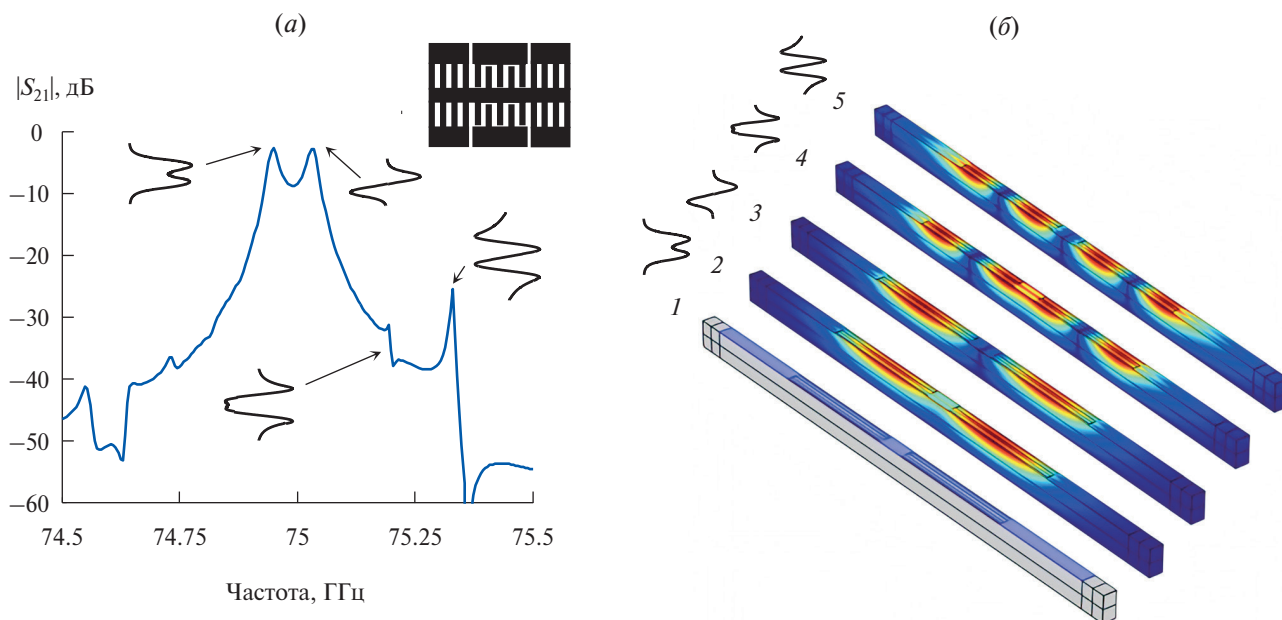


Рис. 11. Принцип учета волноводных мод: а — расчетная АЧХ одного звена фильтра на поперечных модах; б — тестовая структура и картины механических смещений поперечных мод: 1 — геометрия ячейки с периодом $p = \lambda / 2$; 2 — симметричная мода S_0 ; 3 — антисимметричная мода S_1 ; 4 — симметричная мода S_2 ; 5 — антисимметричная мода S_3 .

шины, ширина боковых шин, коэффициент металлизации и толщина металлизации — это те параметры, от которых зависят свойства акустических мод в данной тестовой структуре.

Анализ в области собственных частот проводится для визуализации акустических мод. На рис. 11, б показаны профили механического смещения основной симметричной моды S_0 , первой — антисимметричной моды S_1 , а также симметричной S_2 и антисимметричной S_3 соответственно. Скорость каждой моды зависит от ряда параметров, например, от аперттуры и ширины шины между резонаторами. В зависимости от требуемой ширины полосы пропускания выбирают необходимую аперттуру резонатора — так более широкие полосы легче получать при маленьком значении аперттуры.

3.8. Расчет устройств в целом в 2.5D

Пакет COMSOL позволяет рассчитывать рабочие характеристики (проводимость, АЧХ и др.) устройства в целом [25–28]. Конечной целью расчета устройства является задача нахождения одного из

наборов параметров, который полностью описывает четырехполюсник. Такими параметрами могут быть Z -, Y - или S -параметры четырехполюсника. С помощью COMSOL удобно рассчитывать набор Y -параметров, а по уже известным формулам перейти к набору S -параметров. Как показывает практика, полное 3D-моделирование требует не только больших вычислительных ресурсов (объем оперативной памяти, процессор), но и времени. Поэтому для некоторых задач, а именно для расчета устройств без амплитудной аподизации, пренебрегая эффектами дифракции можно рассчитать упрощенную модель либо 2D, либо 2.5D, предполагая, что полученное решение на малом участке аперттуры будет распространяться на весь преобразователь, с точностью до множителя аперттуры. Предполагаем, что волны, исходящие от преобразователя, имеют прямоугольный профиль, в том числе во всех точках, обусловленных перекрытием аперттуры.

Пример геометрии фильтра на однонаправленных преобразователях типа DART (рис. 12, в) в направлении максимального излучения ПАВ

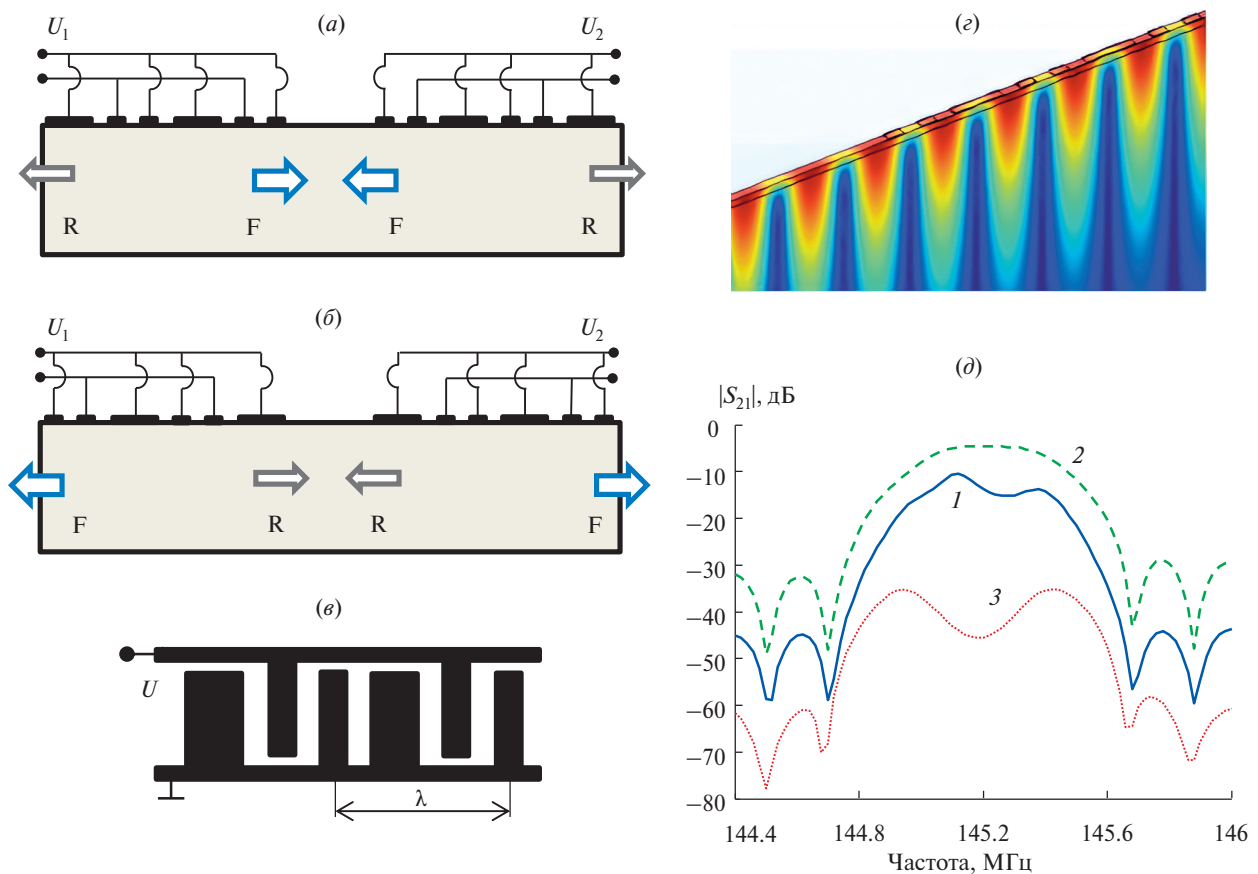


Рис. 12. Модель фильтра на однонаправленных преобразователях типа DART для МКЭ-расчета в COMSOL: *a* — условный вид фильтра с подключенными электрическими портами в “нормальном” включении; *б* — “обратное” включение; *в* — геометрия DART; *г* — результаты расчета полного механического смещения для одной частотной точки; *д* — расчетная АЧХ: 1 — “нормальное” включение без согласования; 2 — “нормальное” включение с согласованием; 3 — “обратное” включение. Обозначения: F — “forward” — направление максимального излучения ПАВ; R — “reverse” — направление минимального излучения волны.

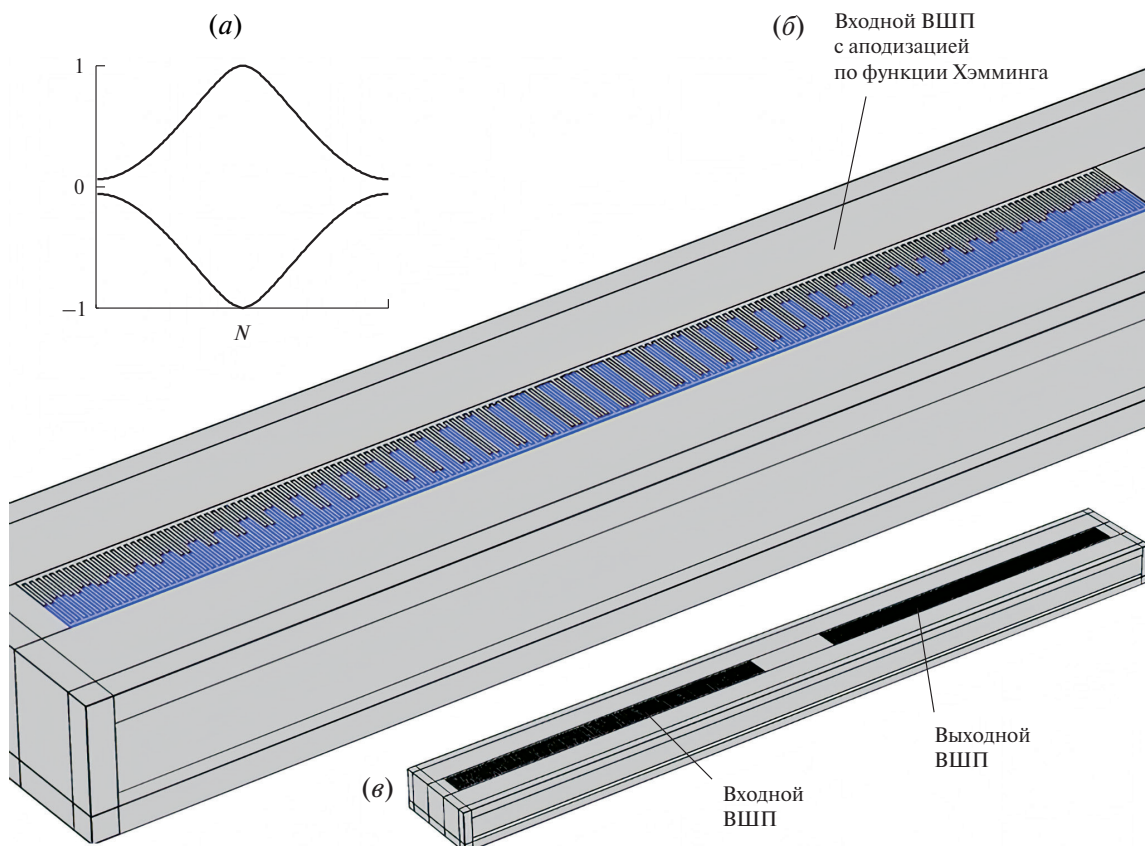


Рис. 13. 3D-модель фильтра на расщепленных преобразователях с аподизацией по функции Хэмминга в COMSOL: *a* — функция Хэмминга; *б* — фрагмент фильтра со входным ВШП; *в* — общий вид геометрии фильтра.

и “обратное” включение представлены на рис. 12, *a*, *б* соответственно. Пример отображения распределения механического смещения для участка геометрии фильтра в результате расчета

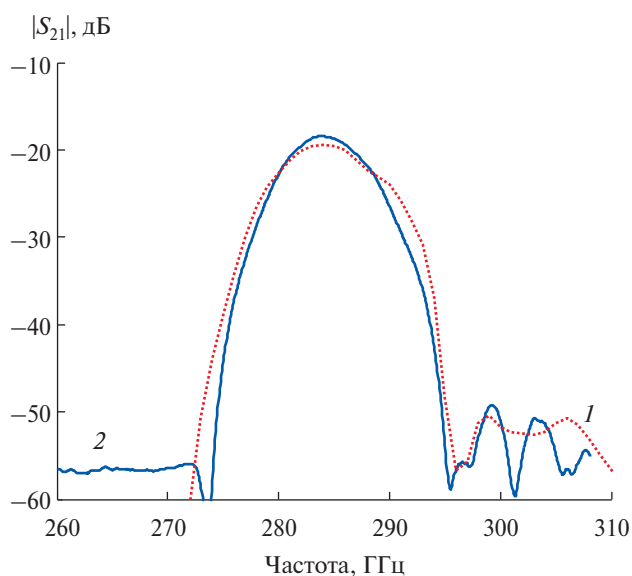


Рис. 14. Сравнение расчетной (1) и экспериментальной (2) АЧХ фильтра.

представлен на рис. 12, *г*. Результаты расчета АЧХ фильтра в согласованном и несогласованном режимах в направлении максимального излучения и “обратном” включении показаны на рис. 12, *д*. По разнице значений АЧХ на центральной частоте можно оценить степень направленности преобразователей в данной топологии. В результате согласования внешними элементами можно добиться уменьшения вносимых потерь и сглаживания АЧХ.

3.9. Анализ полноапертурных устройств

На рис. 13 представлена тестовая топология малоапертурного фильтра, состоящего из двух ВШП (рис. 13, *в*), каждый из которых имеет амплитудную аподизацию перекрытием электродов (рис. 13, *б*) по функции Хэмминга (рис. 13, *а*). Общее число точек сетки составляет более 700000, время счета одной частотной точки — более 6 ч. Результаты расчета АЧХ данного фильтра представлены на рис. 14. Поскольку апертура фильтра составляла три длины волны, то заметно проявляется волноводный эффект, чем и вызвано искажение в форме АЧХ. Волноводные моды высших порядков ярко проявляются в правой части АЧХ и ухудшают полосу заграждения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотренные подходы и возможности пакета COMSOL, в основе которого лежит МКЭ, могут быть использованы для решения прикладных задач по расчету характеристик приборов на ПАВ, а также для анализа волновых акустических процессов в пьезоэлектрических подложках и слоистых структурах. Работа в основных режимах (области собственных частот, статический анализ и анализ в частотной области) позволяет эффективно решать ряд прикладных задач как по анализу параметров акустических волн (скорость, КЭМС и др.), так и по анализу характеристик устройств (проводимость, коэффициент передачи). Переход к моделям пониженного порядка дает возможность существенно сэкономить время и ресурсы компьютера за счет снижения на порядок и более количества переменных и числа степеней свободы. Данные, полученные в результате численного анализа, соответствуют результатам экспериментов и известным литературным источникам.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Аристархов Г.М., Гуляев Ю.В., Дмитриев В.Ф. и др. Фильтрация и спектральный анализ радиосигналов. Алгоритмы. Структуры. Устройства. М.: Радиотехника, 2020. 504 с.
2. Багдасарян А., Синицына Т., Машинин О., Иванов П., Егоров Р. Устройства частотной селекции на ПАВ в современных системах связи, радиолокации и телекоммуникации // Электроника: наука, технология, бизнес. 2013. № 8. С. 128–136.
3. Крысталь Р.Г., Медведь А.В. Применение резонаторов на поверхностных акустических волнах для измерений сверхмалых изменений температуры // Известия РАН. Серия физическая. 2016. Т. 80. С. 1357–1362.
4. Анцев И.Г., Богословский С.В., Сапожников Г.А., Жгун С.А., Жежерин А.Р., Трофимов А.Н., Швецов А.С. Пассивные беспроводные датчики и радиометки на принципах функциональной электроники. М.: Наука, 2021. 518 с.
5. Анисимкин В.И., Кузнецова И.Е. Селективное детектирование температуры микропроб жидкостей акустическими волнами поверхностного типа // РЭ. 2019. Т. 64. № 8. С. 831–834.
6. Койгеров А.С. Достижение критических и предельных параметров в микроприборах на поверхностных акустических волнах // Нано- и микросистемная техника. 2022. Т. 24. № 4. С. 199–207. DOI: 10.17587/nmst.24.199–207.
7. Забеньков И.И., Исаакович Н.Н., Жданов С.Л. и др. Проектирование цифровых приемных устройств // Докл. Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники. 2006. № 1. С. 44–54.
8. Бельчиков С. Фазовый шум: как спуститься ниже –120 дБн/Гц на отстройке 10 кГц в диапазоне частот до 14 ГГц, или Борьба за децибелы // Компоненты и технологии. 2009. № 5 (94). С. 139–146.
9. Дмитриев В.Ф., Носков А.Н. Теоретическое и экспериментальное исследование резонаторов на квази-поверхностных акустических волнах // Акуст. журн. 2010. Т. 56. № 4. С. 472–478.
10. Лойко В.А., Добровольский А.А., Кочемасов В.Н., Сафин А.Р. Автогенераторы на поверхностных акустических волнах (обзор) // Изв. вузов России. Радиоэлектроника. 2022. Т. 25. № 3. С. 6–21.
11. Дьельсеан Э., Руайе Д. Упругие волны в твердых телах. Применение для обработки сигналов. Пер. с франц. / Под ред. В.В. Леманова. М.: Наука, 1982. 424 с.
12. Койгеров А.С., Корляков А.В. Моделирование методом конечных элементов устройств на поверхностных акустических волнах с использованием пакета COMSOL // Микроэлектроника. 2022. Т. 51. № 4. С. 272–282.
13. Койгеров А.С. Аналитический подход к расчету резонаторного комбинированного фильтра на поверхностных акустических волнах на основе модели связанных мод // Изв. вузов России. Радиоэлектроника. 2022. Т. 25. № 2. С. 16–28.
14. Sveshnikov B. Discrete analysis of regular systems // IEEE Intern. Ultrason. Symp. San Diego, USA. 11–14 Oct. 2010. P. 1890–1893. DOI: 10.1109/ULTSYM.2010.5935881.
15. Осетров А.В., Нгуен В.Ш. Расчет параметров поверхностных акустических волн в пьезоэлектриках методом конечных элементов // Вычислительная механика сплошных сред. 2011. Т. 4. № 4. С. 71–80.
16. Sun X., Zhou S., Cheng J., Lin D., Liu W. Full extraction of the COM parameters for Rayleigh type surface acoustic wave. AIP Adv. 2022. № 12. P. 025007.
17. Malocha S., Abbott B.P., Naumenko N. Numerical Modeling of One-Port Resonators Based on Harmonic Admittance // IEEE Ultrasonics Symposium. 2004. Montreal, QC, Canada. V. 3. P. 2027–2030. DOI:10.1109/ULTSYM.2004.1418233.
18. Wallner P., Ruile W., Weigel R. Theoretical Studies on Leaky-SAW Properties Influenced by Layers on Anisotropic Piezoelectric Crystals // IEEE Trans. Ultrason., Ferroelect., Freq. Contr. 2000. V. 47. № 5. P. 1235–1240.
19. Abbott B.P., Hartmann C.S. An efficient evaluation of the electrostatic fields in IDT's with periodic electrode sequences // in Proc. 1993 IEEE Ultrason. Symp. P. 157–160.
20. Benetti M., Cannat'a D., Di Pietrantonio F., Verona E. Growth of AlN Piezoelectric Film on Diamond for High-Frequency Surface Acoustic Wave Devices // IEEE Trans. Ultrason., Ferroelect., Freq. Contr. 2005. V. 52. № 10. P. 1806–1811.
21. Zhang Q., Chen Z., Chen Y., Dong J., Tang P., Fu S., Wu H., Ma J., Zhao X. Periodic Analysis of Surface Acoustic Wave Resonator with Dimensionally Reduced PDE Model Using COMSOL Code. Micromachines. 2021. 12(2):141.
22. Hickernell E.S. // Advances in Surface Acoustic Wave Technology, Systems and Applications. V.I. Eds. Ruppel C.C. W., Fieldly T.A. Singapore: World Scientific, 2001.
23. Takai T., Iwamoto H., Takamine Y., Fuyutsume T., Nakao T., Hiramoto M., Toi T., Koshino M. I.H.P. SAW technology and its application to microacoustic components (Invited) // In Proceedings of the IEEE

- International Ultrasonics Symposium (IUS). Washington, DC, USA. 6–9 September 2017. P. 1–8.
24. *Lilhare Y., Sinha S.* Performance analysis of SAW TCRFs through multiphysics simulation // 2020 IEEE International Conference on Electronics, Computing and Communication Technologies (CONECCT). Bangalore, India. 2020. P. 1–5.
 25. *Квашнин Г.М., Сорокин Б.П., Бурков С.И.* Анализ распространения СВЧ волн Лэмба в пьезоэлектрической слоистой структуре на основе алмаза // Акустический журнал. 2021. Т. 67. № 6. С. 595–602.
 26. *Тимошенко П.Е., Широков В.Б., Калинин В.В.* Конечно-элементное моделирование характеристик ПАВ-фильтров на основе тонких пленок титаната бария стронция // Экологический вестник научных центров ЧЭС. 2020. Т. 17. № 4. С. 48–56.
 27. *Кузнецова И.Е., Смирнов А.В., Плеханова Ю.В., Решетиллов А.Н., Ван Г.-Ц.* Влияние апертуры встречно-штыревого преобразователя на характеристики его выходного сигнала в пьезоэлектрической пластине // Изв. РАН. Сер. физ. 2020. Т. 84. № 6. С. 790–793.
 28. *Zhgoon S., Tsimbal D., Shvetsov A., Bhattacharjee K.* 3D Finite Element Modeling of Real Size SAW Devices and Experimental Validation // 2008 IEEE International Ultrasonics Symposium. Beijing, China. 2008. P. 1932–1935.

APPLICATION OF THE FINITE ELEMENT METHOD FOR CALCULATING THE SURFACE ACOUSTIC WAVE PARAMETERS AND DEVICES

© 2024 A. S. Koigerov

*St. Petersburg State Electrotechnical University “LETI”
Saint Petersburg Electrotechnical University, St Petersburg, Russia
E-mail: a.koigerov@gmail.com*

A series of models based on the finite element method (FEM) for analyzing the parameters of surface acoustic waves (SAW) and devices based on them are described. The computer method for generating models in the COMSOL Multiphysics is described. Three main studies in the COMSOL are described and graphically illustrated: stationary, eigenfrequency, frequency domain. The properties of Rayleigh waves and leaky SAW are analyzed. A visualization of a number of characteristics is presented. The analysis of such parameters as phase velocity of the wave, electromechanical coupling coefficient, and static capacitance of transducer is considered. The examples consider an equidistant transducer, a transducer with split electrodes, and a unidirectional transducer of the DART type. Methods for analyzing SAW harmonics and the waveguide effect are proposed. It is shown that the model is valid for both single-crystal substrates and layered structures. The analysis of the temperature coefficient of frequency for such structures as TCSAW and I.H.P.SAW is considered. A model for calculating the amplitude-frequency responses of devices is presented. It is shown that the data obtained as a result of numerical analysis correspond to experimental data and known literature sources.

Keywords: acoustoelectronic, surface acoustic waves, inter digital transducer, SAW filter, finite element method, COMSOL, TCSAW, I.H.P, SAW harmonics

REFERENCES

1. *Aristarkhov G.M., Gulyaev Yu.V., Dmitriev V.F. et al.* Fil'tratsiya i spektral'nyi analiz radiosignalov. Algoritmy. Struktury. Ustroistva (Filtering and Spectral Analysis of Radio Signals. Algorithms. Structures. Devices). Moscow: Radiotekhnika, 2020.
2. *Bagdasaryan A., Sinitzina T., Mashinin O., Ivanov P., Egorov R.* SAW frequency selection devices for modern communication, radiolocation and telecommunication systems // Electronics: Science, Technology, Business. 2013. No. 8. P. 128–136 [in Russian].
3. *Kryshchal R.G., Medved A.V.* Primenenie rezonatorov na poverkhnostnykh akusticheskikh volnakh dlya izmereniya sverkhmalykh izmereniy temperatury // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2016. V. 80. P. 1357–1362 [in Russian].
4. *Antcev I.G., Bogoslovsky S.V., Sapognikov G.A., Zhgoon S.A., Zhezherin A.R., Trofimov A.N., Shvetsov A.S.* Passivhye besprovodnyye datchiki i radiometki na print-sipakh funktsional'noy elektroniki [Passive Wireless Sensors and Radio Tags Based on the Principles of Functional Electronics]. Moscow: Nauka, 2021. 518 p. [in Russian].
5. *Anisimkin V.I., Kuznetsova I.E.* Selective surface acoustic wave detection of the temperature of a liquid microsample // Journal of Communications Technology and Electronics. 2019. T. 64. No. 8. P. 823–826.
6. *Koigerov A.S.* Achievement of Critical and Limiting Parameters in Surface Acoustic Wave Micro-devices // Nano- I mikrosistemnaya tekhnika. 2022. V. 24. No. 4. P. 199–207 [in Russian].
7. *Zabenkov I.I., Isakov N.N., Zhdanov S.L., Yenkov D.A., Zabenkov A.I.* Digital receivers design // Doklady BGUIR. 2006. No. 1. P. 44–54 [in Russian].
8. *Belchikov S.* Fazovyy shum: kak spustit'sya nizhe — 120 dB/Hz na otstroike 10 kHz v diapazone chastot do

- 14 GHz, ili bor'ba za detsibely // Components and technologies. 2009. No. 5 (94). P. 139–146 [in Russian].
9. *Dmitriev V.F., Noskov A.N.* Theoretical and experimental studies of quasi-surface acoustic wave resonators // Acoustical physics. 2010. V. 56. No. 4. P. 475–481.
10. *Loiko V.A., Dobrovolsky A.A., Kochemasov V.N., Safin A.R.* Self-Oscillators Based on Surface Acoustic Waves (A Review) // Journal of the Russian Universities. Radioelectronics. 2022. V. 25. No. 3. P. 6–21 [in Russian].
11. *Dieulesaint E. and Royer D.* Ondes élastiques dans les solides: Application au traitement du signal. Paris: Masson, 1974.
12. *Koigerov A.S., Korlyakov A.V.* Finite Element Modeling of Surface Acoustic Wave Devices Using COMSOL // Russ. Microelectron. 2022. V. 51. P. 226–235.
13. *Koigerov A.S.* Analytical Approach to Designing a Combined-Mode Resonator Filter on Surface Acoustic Waves Using the Model of Coupling of Modes // Journal of the Russian Universities. Radioelectronics. 2022. V. 25. No. 2. P. 16–28 [in Russian].
14. *Sveshnikov B.* Discrete analysis of regular systems // IEEE Intern. Ultrason. Symp. San Diego, USA. 11–14 Oct. 2010. P. 1890–1893.
DOI: 10.1109/ULTSYM.2010.5935881.
15. *Osetrov A.V. and Nguen V.Sh.* Calculation of the parameters of surface acoustic waves in piezoelectrics using the finite element method // Vychisl. Mekh. Splosh. Sred. 2011. V. 4. No. 4. P. 71–80.
16. *Sun X., Zhou S., Cheng J., Lin D., Liu W.* Full extraction of the COM parameters for Rayleigh type surface acoustic wave. AIP Adv. 2022. No. 12. P. 025007.
17. *Malocha S., Abbott B.P., Naumenko N.* Numerical Modeling of One-Port Resonators Based on Harmonic Admittance // IEEE Ultrasonics Symposium. 2004. Montreal, QC, Canada. V. 3. P. 2027–2030.
DOI: 10.1109/ULTSYM.2004.1418233.
18. *Wallner P., Ruile W., Weigel R.* Theoretical Studies on Leaky-SAW Properties Influenced by Layers on Anisotropic Piezoelectric Crystals // IEEE Trans. Ultrason., Ferroelect., Freq. Contr. 2000. V. 47. No. 5. P. 1235–1240.
19. *Abbott B.P., Hartmann C.S.* An efficient evaluation of the electrostatic fields in IDT's with periodic electrode sequences // in Proc. 1993 IEEE Ultrason. Symp. P. 157–160.
20. *Benetti M., Cannat'a D., Di Pietrantonio F., Verona E.* Growth of AlN Piezoelectric Film on Diamond for High-Frequency Surface Acoustic Wave Devices // IEEE Trans. Ultrason., Ferroelect., Freq. Contr. 2005. V. 52. No. 10. P. 1806–1811.
21. *Zhang Q., Chen Z., Chen Y., Dong J., Tang P., Fu S., Wu H., Ma J., Zhao X.* Periodic Analysis of Surface Acoustic Wave Resonator with Dimensionally Reduced PDE Model Using COMSOL Code // Micromachines. 2021. 12(2):141.
22. *Hickernell F.S.* Advances in Surface Acoustic Wave Technology, Systems and Applications. V. 1. Eds. Ruppel C.C.W., Fieldly T.A. Singapore: World Scientific, 2001.
23. *Takai T., Iwamoto H., Takamine Y., Fuyutsume T., Nakao T., Hiramoto M., Toi T., Koshino M.* I.H.P. SAW technology and its application to microacoustic components (Invited) // In Proceedings of the IEEE International Ultrasonics Symposium (IUS). Washington, DC, USA. 6–9 September 2017. P. 1–8.
24. *Lilhare Y., Sinha S.* Performance analysis of SAW TCRFs through multiphysics simulation // 2020 IEEE International Conference on Electronics, Computing and Communication Technologies (CONECCT). Bangalore, India. 2020. P. 1–5.
25. *Kvashnin G.M., Sorokin B.P., Burkov S.I.* Study of propagation of microwave lamb waves in a piezoelectric layered structure // Acoust. Phys. 2021. V. 67. P. 590–596.
26. *Timoshenko P.E., Shirokov V.B., Kalinchuk V.V.* Finite-Element Modeling of SAW-Filters Based on Thin Films of Barium Strontium Titanate // Ecological Bulletin of Research Centers of the Black Sea Economic Cooperation. 2020. V. 17. No. 4. P. 48–56 [in Russian].
27. *Kuznetsova I.E., Smirnov A.V., Plekhanova Y.V., Reshetilov A.N., Wang G.-J.* Effect of the Aperture Interdigital Transducer on the Characteristics of Its Output Signal in a Piezoelectric Plate // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2020. V. 84. No. 6. P. 644–647.
28. *Zhgoon S., Tsimbal D., Shvetsov A., Bhattacharjee K.* 3D Finite Element Modeling of Real Size SAW Devices and Experimental Validation // 2008 IEEE International Ultrasonics Symposium, Beijing, China. 2008. P. 1932–1935.

НОВЫЙ ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ РАДИАЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ НИЗКОЙ ИНТЕНСИВНОСТИ В БИПОЛЯРНЫХ МИКРОСХЕМАХ

© 2024 г. А. И. Чумаков

Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ” –
АО “ЭНПО СПЭЛС”, Москва, Россия

E-mail: aichum@spels.ru

Поступила в редакцию 18.12.2023 г.

После доработки 01.02.2024 г.

Принята к публикации 05.02.2024 г.

Предложена модель для объяснения эффектов низкой интенсивности при воздействии ионизирующего излучения в биполярных структурах с учетом подпорогового дефектообразования в высоколегированных кремниевых слоях. Рассмотрены варианты деградации тока базы в биполярном транзисторе с учетом одновременного действия поверхностных радиационных эффектов и структурных повреждений в приповерхностной базовой области. Выявлены условия возникновения эффектов низкой мощности поглощенной дозы в биполярных структурах. Представленные результаты анализа позволяют объяснить большинство наблюдаемых экспериментальных результатов.

Ключевые слова: биполярные ИС, низкая интенсивность, радиация, подпороговое дефектообразование

DOI: 10.31857/S0544126924020047

1. ВВЕДЕНИЕ

Радиационные эффекты низкой интенсивности (Enhanced Low Dose Rate Sensitivity – ELDRS) были обнаружены впервые в начале 1990-х гг. [1], когда было установлено, что деградация коэффициента усиления тока базы в некоторых аналоговых микросхемах на биполярных транзисторах зависит от мощности поглощенной дозы для значений менее 100 рад(Si)/с. При одной и той же суммарной поглощенной дозе облучения деградация коэффициента усиления биполярного транзистора B_n при низкой интенсивности существенно превосходила деградацию B_n при большой интенсивности. Подобное поведение прямо противоположно тому, что обычно наблюдается в КМОП ИС [2]. В биполярных ИС, чувствительных к ELDRS, диапазон значений мощности дозы, в котором наблюдается усиление деградации при снижении интенсивности облучения, находится в пределах $\sim 10^{-3}$ –10 рад(Si)/с [3, 4].

Эффект ELDRS не может быть промоделирован путем высокоинтенсивного облучения с последующим отжигом, как это часто делается в случае МОП-приборов. По этой причине оценку радиационной стойкости биполярных ИС с учетом эффекта ELDRS проводят при облучении с интенсивностью около 0.01 рад(Si)/с (как правило,

с использованием коэффициента запаса по дозе, равного 1.5). Однако это значение не является универсальным и в редких случаях насыщение эффекта может происходить при еще более низких значениях мощности дозы [3].

Исследованию эффекта ELDRS посвящено достаточно много работ [3–7], среди которых наиболее признанными являются модели, основанные на увеличении выхода заряда в оксиде при низкоинтенсивном облучении (модели пространственного заряда, модель мелких ловушек) [3, 7–9], и модели увеличения темпа встраивания поверхностных состояний на границе кремния и пассивирующего оксида при снижении мощности дозы (бимолекулярные модели, модели, основанные на решении уравнений переноса протонов и дырок в оксиде) [3, 7, 10, 11]. Однако оба этих подхода не всегда приводят к корректному результату.

Все предлагаемые выше подходы базируются на рассмотрении процессов, связанных только с накоплением заряда в оксидах или на поверхностных состояниях, т.е. анализируют только поверхностные радиационные эффекты. Поэтому возникает резонный вопрос, почему подобные эффекты отсутствуют в МОП-структурах, где также возможны аналогичные процессы. Ответ надо искать в различиях принципов работ этих приборов. Основное отличие МОП-транзисторов от

биполярных заключается в том, что деградация последних зависит не только от процессов, происходящих в оксида и на границе раздела, но и также в объеме самой полупроводниковой структуры при вводе радиационных дефектов. Именно в этом направлении, скорее всего, и надо искать объяснение эффекта ELDRS.

2. ПОДПОРОГОВОЕ ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЕ

Классический подход к моделированию радиационных дефектов (структурных повреждений) в полупроводниках базируется на пороговом характере образования первичных радиационных дефектов (РД) — вакансий и междоузлий, которые вследствие диффузии перемещаются и образуют стабильные радиационные дефекты: А-центры, Е-центры, дивакансии и т.д. [12–14]. Вследствие относительно высокой пороговой энергии дефектообразования в кремнии (около 15 эВ) образование первичных дефектов возможно только при относительно высоких энергиях частиц ионизирующего излучения (более сотен кэВ для гамма- и электронного излучений), поэтому относительно мягкое рентгеновское излучение не способно вызывать структурные повреждения.

Однако по мере увеличения уровня легирования до концентраций порядка 10^{19} – 10^{20} см⁻³ структура кристаллической решетки сильно изменяется, что может приводить к образованию РД в подпороговой области, т.е. при энергиях значительно меньших, чем энергия, необходимая для классических структурных повреждений. Механизмы создания дефектов в этих случаях называют подпороговыми и связывают с возникновением и распадом различного типа электронных возбуждений: рентгеновских, возникающих при ионизации внутренних уровней атомов, плазмонов, оптических экситонов и электронно-дырочных пар [14, 15]. Генерация стабильных дефектов в атомной структуре материала при распаде электронных возбуждений возможна, если выполняются следующие условия [15]:

- энергия электронного возбуждения больше энергии создания пары вакансия — междоузлие;
- среднее время жизни локализованного электронного возбуждения в узле больше периода тепловых колебаний атомов.

Например, возможное образование подпороговых радиационных дефектов в относительно сильнолегированных структурах для ионизационного механизма связано с передачей электрону k -оболочки энергии порядка 6 кэВ [16]. Таким образом, в сильнолегированных областях (эмиттер, сток/исток и т.д.) потенциально возможна генерация первичных РД при энергиях частиц ионизирующего излучения в районе единиц килоэлектронвольт.

3. ФОРМИРОВАНИЕ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В ПРИПОВЕРХНОСТНОЙ ОБЛАСТИ

Образование первичных РД в эмиттерной области практически не приведет к изменениям электрических характеристик биполярного транзистора в силу как самой изначальной дефектности этой области, так и слабого влияния ее характеристик на усилительные свойства прибора. Но из этой области первичные РД могут за счет диффузии перемещаться в соседнюю базовую область, в которой роль подпороговых эффектов незначительна из-за существенно меньшей концентрации легирования.

Таким образом, при наличии дополнительного механизма рекомбинации на РД увеличение тока базы ΔI_b можно записать в следующем виде:

$$\Delta I_b \approx \Delta I_{gp} + \Delta I_s,$$

где ΔI_{gp} — ток в обедненной области эмиттерного перехода у поверхности; ΔI_s — приращение поверхностного тока, изменению которого и посвящены работы по исследованию эффектов низкой интенсивности [6, 7].

В данной работе рассмотрим только влияние образующихся подпороговых РД на величину тока ΔI_{gp} при следующих допущениях: генерация РД происходит только в эмиттерной области, одномерное приближение, диффузия имеет место только в приповерхностной области. Другими словами, увеличение тока ΔI_{gp} происходит на рекомбинационных центрах в области пространственного заряда (ОПЗ) эмиттерного перехода, которые образуются из-за диффузии первичных РД (возможно и стабильных РД), генерируемых в эмиттерной области (рис. 1).

Под действием облучения в высоколегированной приповерхностной области эмиттера образуются первичные РД: вакансии и междоузлия. Их концентрацию N_{srd} без учета процессов их аннигиляции можно оценить из следующего соотношения:

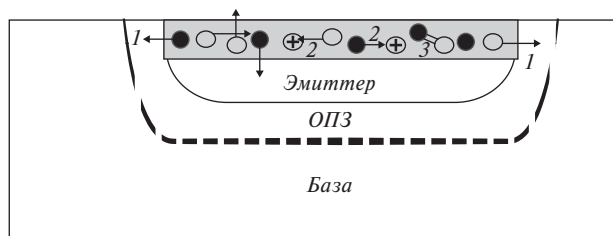


Рис. 1. Формирование подпороговых радиационных дефектов в высоколегированной области эмиттера: 1 — диффузия первичных РД; 2 — создание стабильных РД; 3 — аннигиляция первичных РД; ● — междоузлие; ○ — вакансия; ⊕ — ядро атома кристаллической решетки.

$$N_{srd} \approx P_{\gamma} g_{srd} t, \quad (1)$$

где P_{γ} — мощность поглощенной дозы; g_{srd} — скорость генерации подпороговых радиационных дефектов; t — время облучения.

При энергии образования подпороговых РД порядка нескольких килоэлектронвольт $g_{srd} \sim 10^{10} - 10^{11}$ пар/(рад(Si) $\times$ см³).

Заметные изменения тока базы биполярного транзистора при облучении гамма-квантами происходит при уровнях поглощенной дозы около/выше 10 крад(Si). Если же брать только дефектообразование, то подобные же изменения наблюдаются при концентрации первичных РД на уровне 10^{15} см⁻³. Нетрудно заметить из соотношения (1), что данная концентрация по порядку величины как раз и получается при уровнях поглощенной дозы в районе 10 крад(Si).

Очевидно, что часть этих подпороговых РД в процессе воздействия рекомбинируют между собой либо создают стабильные радиационные дефекты непосредственно в эмиттерной области (см. рис. 1, процессы 2 и 3). Тем не менее часть из них диффундирует в ОПЗ эмиттерного перехода (см. рис. 1, процесс 1). В первом приближении можно считать, что диффузия идет из источника постоянной генерации РД [16]. В общем случае провести точные количественные оценки затруднительно из-за отсутствия достоверных сведений по коэффициентам диффузии междоузлий и вакансий в относительно высоколегированной приповерхностной области. При этом на этот процесс также могут оказывать влияние радиационно-стимулированная диффузия, зарядовые состояния первичных РД, наличие сильного электрического поля и т.д.

Грубые оценки коэффициента диффузии можно получить из имеющихся экспериментальных данных по эффектам низкой интенсивности в биполярных структурах. Предположим, что при $P_{\gamma} = 1$ рад(Si)/с после облучения суммарной дозой равной 10 крад(Si) в деградацию коэффициента усиления биполярного транзистора дают равный вклад обе составляющих тока базы. Это условие, например, достигается при средней концентрации первичных РД в приповерхностной ОПЗ эмиттерного перехода на уровне 3×10^{14} см⁻³. Оценки показывают, что при толщине ОПЗ (с учетом влияния части приповерхностной пассивной базы) это условие соблюдается при коэффициенте диффузии первичных радиационных дефектов на уровне $10^{-14} - 10^{-15}$ см²/с, что является вполне приемлемой величиной.

На рис. 2 представлены графики зависимостей изменений усредненных концентраций первичных РД от времени при различных мощностях дозы для чувствительной области шириной 0.2 мкм. При оценках использовались следующие величины: $g_{srd} = 3 \times 10^{10}$ пар/(рад(Si) $\times$ см³), коэффициент

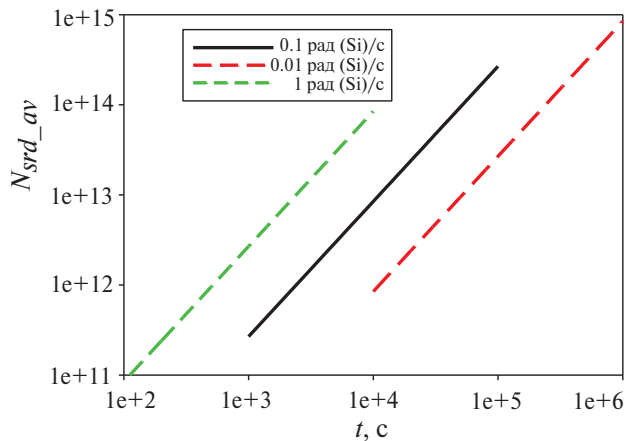


Рис. 2. Изменения усредненной концентрации первичных РД при разных интенсивностях облучения для чувствительной области шириной равной 0.2 мкм.

диффузии 10^{-14} см²/с и суммарная поглощенная доза 10 крад(Si). Нетрудно заметить, что хотя зависимости ведут себя практически одинаково, конечное значение усредненной концентрации РД внутри чувствительной области имеет максимальное значение при наименьшем значении мощности поглощенной дозы. В рассматриваемом примере при достижении интенсивности излучения менее 0.1 мрад(Si)/с изменение средней концентрации фактически уже не изменяется, что свидетельствует о насыщении в изменении деградации от P_{γ} .

Данный вывод наглядно иллюстрирует рис. 3, на котором представлены распределения первичных РД по координате в момент окончания облучения. Таким образом, в этот момент усредненная концентрация первичных РД в чувствительной области увеличивается при уменьшении мощности поглощенной дозы. Отметим, что с ростом температуры эффекты низкой интенсивности будут иметь

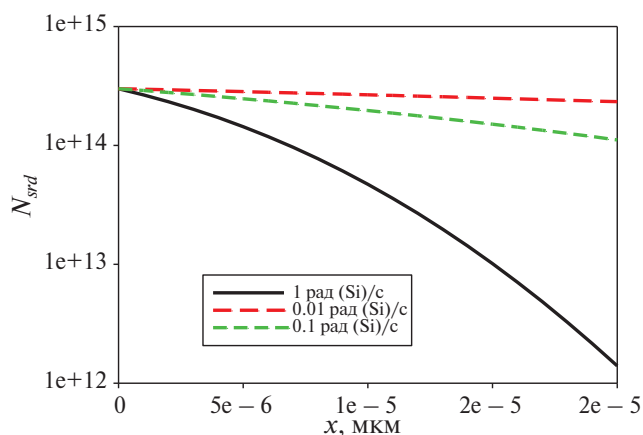


Рис. 3. Изменения профилей распределения первичных РД в момент окончания облучения для разных интенсивностей.

место при более высокой мощности дозы излучения. В предлагаемой модели данная зависимость объясняется ростом коэффициента диффузии при повышении температуры. По сути дела, предлагаемая модель сразу позволяет объяснить сразу несколько наблюдаемых экспериментальных результатов: увеличение чувствительности в биполярных структурах при уменьшении интенсивности ионизирующего излучения, отсутствие подобного эффекта в МОП-транзисторах, наличие насыщения при уменьшении мощности поглощенной дозы, ускорение процессов при повышении температуры.

Скорее всего, после облучения относительно высокой интенсивностью будет иметь место продолжение диффузионных процессов при больших временах. Однако при этом надо учесть, что уже отсутствует генерация первичных РД, нет условия для радиационно-стимулированной диффузии и появляется градиент диффузии в обратную сторону.

Таким образом, при достаточно грубых приближениях на полуколичественном уровне получено, что эффекты низкой интенсивности и их характерные зависимости могут быть объяснены учетом подпорогового дефектообразования в высоколегированной эмиттерной области и последующей диффузией РД в базовую область.

4. ИЗМЕНЕНИЕ ТОКА БАЗЫ

Предлагаемый подход можно было бы успешно апробировать для всех биполярных ИС, если бы приращение составляющей тока базы в приповерхностной области ОПЗ эмиттерного перехода доминировало над всеми другими компонентами. Однако существенным дополнительным фактором, усложняющим проведение количественных оценок, является влияние приращения поверхностного тока базы ΔI_s [17]. Его величина может быть как больше, так и меньше ΔI_{gp} , при этом соотношение между ними изменяется при разных интенсивностях. Если предположить, что, как и в обычных МОП-структурах, приращение ΔI_s уменьшается при снижении интенсивности, а ΔI_{gp} — увеличивается, то можем получать совершенно разные зависимости уровня стойкости биполярных ИС от мощности поглощенной дозы (рис. 4).

В первом примере доминирует ток поверхностной рекомбинации, поэтому суммарный ток при увеличении мощности дозы может быть постоянным или даже немного увеличиваться, как показано на рис. 4. Во втором случае имеет место доминирование тока рекомбинации на РД, вследствие чего уровень стойкости падает при уменьшении интенсивности излучения. Другими словами, здесь имеет место классический ELDRS-эффект.

Точно учесть вклад каждой составляющей тока базы достаточно затруднительно, так как большинство радиационно-чувствительных параметров не

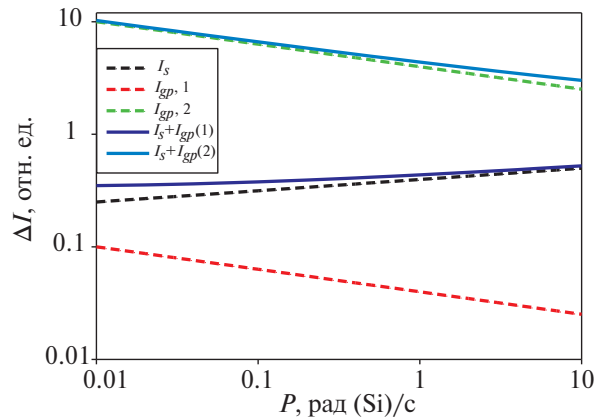


Рис. 4. Возможные изменения приращения суммарного тока базы при различных соотношениях между его составляющими.

известны и трудно контролируемы. Например, можно предположить, что скорость генерации первичных РД зависит от концентрации легирования (профиля легирования), а вклад поверхностных эффектов — от способов получения оксида. Тем не менее можно выявить причины, влияющие на вклад каждой составляющей.

В первую очередь это относится к площади поверхности биполярного транзистора, чувствительной к каждой компоненте. Для тока ΔI_{gp} эта величина определяется площадью ОПЗ, окружающей эмиттерный переход по поверхности биполярного транзистора. Возможно некоторое увеличение этой площади за счет небольшого вклада пассивной базы, в том числе и областей около высоколегированных p^+ -областей, используемых для предотвращения утечек. Кроме этого надо учесть, что величина ΔI_{gp} в сильной степени зависит от уровня легирования эмиттера, т.е. от условий возникновения подпороговых РД. Можно предположить, что при уровнях легирования менее $10^{18} - 10^{19} \text{ см}^{-3}$ этим механизмом можно пренебречь.

Ток поверхностной рекомбинации ΔI_s зависит от общей площади поверхности, контактирующей с эмиттерным переходом и базовой областью. Помимо этого эта величина в сильной степени определяется параметрами оксида и может отличаться для пассивирующих и изолирующих оксидов. Таким образом, вклад каждой составляющей в значительной степени будет зависеть от технологических особенностей изготовления конкретных биполярных ИС. Другими словами, в ряде биполярных ИС может иметь место ELDRS-эффект ($\Delta I_{gp} > \Delta I_s$), в других — он отсутствует ($\Delta I_{gp} < \Delta I_s$).

Тем не менее там, где эффекты ELDRS проявляются явно, можно пренебречь составляющей ΔI_s и оценки проводить только с учетом ΔI_{gp} . На рис. 5 в качестве примера представлено сравнение расчетных и экспериментальных зависимостей [5]

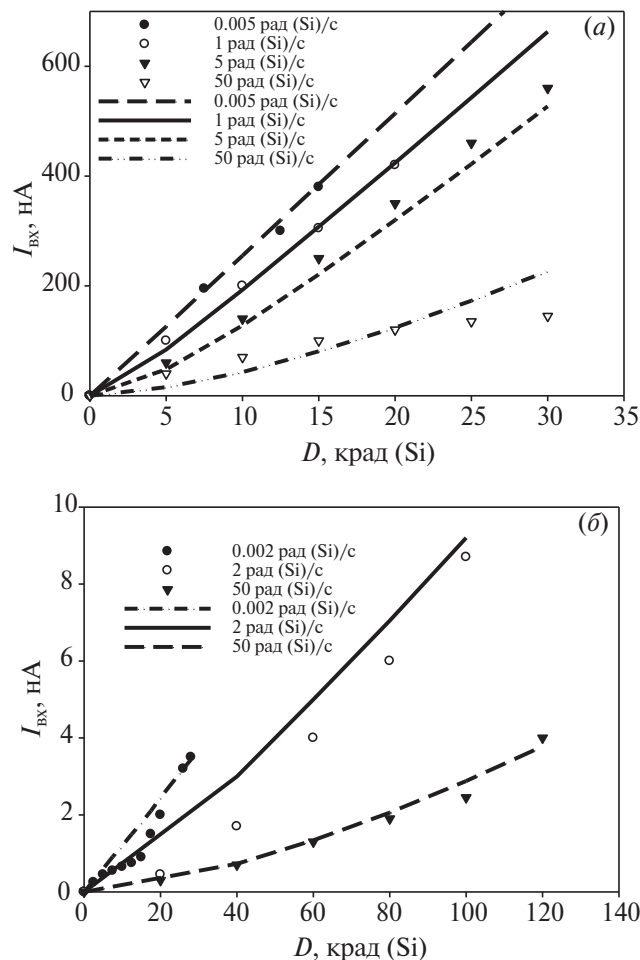


Рис. 5. Сравнение расчетных и экспериментальных значений изменений тока базы при облучении с разными интенсивностями: а – входной ток операционного усилителя LM108A; б – входной ток компаратора LM111, облучение при $T = 90^\circ\text{C}$ [5].

с использованием предлагаемой модели. При оценках предполагалось, что

$$\Delta I_{gp} = K_r N_{srd_av},$$

где K_r – коэффициент радиационной чувствительности биполярного транзистора по изменению тока базы при вводе РД.

Параметры K_r , N_{srd_av} подбирались из соответствия расчетных и экспериментальных зависимостей. Из представленных зависимостей видно, что предлагаемый подход удовлетворительно описывает экспериментальные результаты, что позволяет предлагать его для дальнейшего развития по моделированию эффектов ELDRS в биполярных структурах ИС.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты представленной работы позволяют выделить следующие основные выводы:

– образование подпороговых радиационных дефектов в высоколегированной эмиттерной области с последующей их диффузией в приповерхностную область базы может иметь доминирующее значение для моделирования эффекта увеличения радиационной чувствительности биполярных структур с уменьшением мощности дозы (ELDRS-эффект);

– происходит одновременное действие двух противоположных тенденций в составляющих тока базы: увеличение тока базы за счет роста рекомбинации на вводимых радиационных дефектах и невозрастание поверхностного тока базы при уменьшении мощности поглощенной дозы в общем случае может приводить к различным зависимостям тока базы от интенсивности излучения;

– сравнение расчетных результатов приближенного моделирования с экспериментальными данными показывает их удовлетворительное соответствие, что свидетельствует о корректности используемых приближений и влиянии подпороговых механизмов дефектообразования на ELDRS-эффект.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Nowlin R.N. et al. Hardness assurance and testing issues for bipolar/BiCMOS devices // IEEE Trans. Nucl. Sci. 1993. V. 40. No. 6. P. 1686–1691.
2. Ionizing radiation effects in MOS devices and circuits / Ed. Ma T.-P., Dressendorfer P. V. New York: John Wiley & Sons, 1989. 608 p.
3. Adell P.C., Boch J. Dose and Dose-Rate Effects in Micro-Electronics: Pushing the Limits to Extreme Conditions // 2014 IEEE NSREC. Short Course Notebook “Radiation Environments and Their Effects on Devices From Space to Ground”. Paris, France, 2014. P. II-1–II-102.
4. Беляков В.В. и др. Методы прогнозирования эффектов полной дозы в элементах современной микроэлектроники // Микроэлектроника. 2003. Том 32. № 1. С. 31–46.
5. Першенков В.С., Скоробогатов П.К., Улимов В.Н. Дозовые эффекты в изделиях современной микроэлектроники: Учебное пособие. М.: НИЯУ МИФИ, 2011. 172 с.
6. Першенков В.С. Дозовые эффекты в изделиях микроэлектроники при воздействии ионизирующих излучений / В кн.: Радиационная стойкость изделий ЭКБ: Научное издание / Под ред. А.И. Чумакова. М.: НИЯУ МИФИ, 2015. С. 93–130.
7. Pease R. L. et al. ELDRS in Bipolar Linear Circuits: A Review // IEEE Trans. Nucl. Sci. 2009. V. 56. No. 4. P. 1686–1691.
8. Fleetwood D. M. et al. Physical mechanisms contributing to enhanced bipolar gain degradation at low dose rates // IEEE Trans. Nucl. Sci. 1994. V. 41. No. 6. P. 1871–1883.
9. Fleetwood D. M. et al. Radiation effects at low electric fields in thermal, SIMOX, and bipolar-base oxides // IEEE Trans. Nucl. Sci. 1996. V. 43. No. 6. P. 2537–2546.

10. *Rashkeev S. N. et al.* Physical model for enhanced interface-trap formation at low dose rates // IEEE Trans. Nucl. Sci. 2002. V. 49. No. 6. P. 2650–2655.
11. *Першенков В.С. и др.* Конверсионная модель эффекта низкой интенсивности в биполярных микроэлектронных структурах при воздействии ионизирующего излучения // Микроэлектроника. 2010. Том 39. № 2. С. 102–112.
12. *Чумаков А.И.* Действие космической радиации на ИС. М.: Радио и связь, 2004. 320 с.
13. *Вавилов В.С., Киселев В.Н., Мукашев Б.Ф.* Дефекты в кремнии и на его поверхности. М.: Наука, 1990. 216 с.
14. *Емцев В.В., Машовец Т.В.* Примеси и точечные дефекты в полупроводниках. М.: Радио и связь, 1981. 248 с.
15. *Алешина Л.А.* Структура аморфных материалов и природа дефектов в них. Электронное учебное пособие. ПетрГУ, 2016.
16. *Вавилов В.С., Кекелидзе Н.П., Смирнов Л.С.* Действие излучений на полупроводники: Учеб. пособие. М.: Наука. Гл. ред. Физ.-мат. Лит., 1988. 182 с.
17. *Зи С.* Физика полупроводниковых приборов: В 2-х книгах. Кн. 1. / Пер. с англ. 2-е изд., переработ. и доп. М.: МИР, 1984. 456 с.
18. *Першенков В.С. и др.* Расчет тока поверхностной рекомбинации в биполярных микроэлектронных структурах при воздействии ионизирующего излучения // Микроэлектроника. 2009. Том 38. № 1. С. 21–33.

THE NEW APPROACH OF A SIMULATION LOW DOSE RATE RADIATION EFFECTS IN BIPOLAR INTEGRATED CIRCUITS

© 2024 A. I. Chumakov

*National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow
JSC Specialized Electronic Systems, Moscow, Russia
E-mail: aichum@spels.ru*

The model is proposed to explain the effects of low dose rate under the radiation influence in bipolar structures, taking into account the effects of subthreshold displacement in high-doped silicon layers. The base current degradation of bipolar transistor is determined of surface and displacement radiation effects in the near-surface base area. The conditions for the enhanced low dose rate sensitivity (ELDRS) in bipolar structures are shown. The presented results of the analysis allow us to explain most of the observed experimental results.

Keywords: Bipolar ICs, Low Dose Rate, Radiation, Subthreshold Displacement

REFERENCES

1. *Nowlin R.N. et al.* Hardness assurance and testing issues for bipolar/BiCMOS devices // IEEE Trans. Nucl. Sci. 1993. V. 40. No. 6. P. 1686–1691.
2. *Ionizing radiation effects in MOS devices and circuits* / Ed. Ma T.-P., Dressendorfer P. V. New York: John Wiley&Sons, 1989. 608 p.
3. *Adell P.C., Boch J.* Dose and Dose-Rate Effects in Micro-Electronics: Pushing the Limits to Extreme Conditions // 2014 IEEE NSREC. Short Course Notebook “Radiation Environments and Their Effects on Devices From Space to Ground”. Paris, France, 2014. P. II-1–II-102.
4. *Belyakov V.V. et al.* Methods for the prediction of total-dose effects on modern integrated semiconductor devices in space: a review // Russian Microelectronics. 2003. V. 32. No. 1. P. 25–38.
5. *Pershenkov V.S., Skorobogatov P.K., Ulimov V.N.* Dose effects in modern microelectronics products: Tutorial. NRNU MEPhI, 2011/72 p. [in Russian].
6. *Pershenkov V.S.* Dose effects in microelectronics products under irradiation // Radiation Hardness of electronic components / Ed. by. Chumakov A. I. NRNU MEPhI, 2015. 512 p. [in Russian]. P. 93–130.
7. *Pease R.L. et al.* ELDRS in Bipolar Linear Circuits: A Review // IEEE Trans. Nucl. Sci. 2009. V. 56. No. 4. P. 1686–1691.
8. *Fleetwood D.M. et al.* Physical mechanisms contributing to enhanced bipolar gain degradation at low dose rates // IEEE Trans. Nucl. Sci. 1994. V. 41. No. 6. P. 1871–1883.
9. *Fleetwood D.M. et al.* Radiation effects at low electric fields in thermal, SIMOX, and bipolar-base oxides // IEEE Trans. Nucl. Sci. 1996. V. 43. No. 6. P. 2537–2546.
10. *Rashkeev S.N. et al.* Physical model for enhanced interface-trap formation at low dose rates. // IEEE Trans. Nucl. Sci. 2002. V. 49. No. 6. P. 2650–2655.
11. *Pershenkov V.S. et al.* Conversion model of enhanced low-dose-rate sensitivity for bipolar ICs // Russian Microelectronics. 2010. V. 39. No. 2. P. 91–99.
12. *Chumakov A.I.* Space Radiation Effects in ICs. Moscow: Radio I Svyaz, 2004. 320 p. [in Russian].
13. *Vavilov V.S., Kiselev V.N., Mukashev B.F.* Defects in silicon and on its surface. Moscow: Nauka, 1990. 216 p. (in Russian).
14. *Yemtsev V.V., Mashovets T.V.* Impurities and point defects in semiconductors. Moscow: Radio I Svyaz, 1981. 248 p. [in Russian].
15. *Alyoshina L.A.* The structure of amorphous materials and the nature of defects in them. Electronic Tutorial. PetrSU2016 [in Russian].
16. *Vavilov V.S., Kekelidze N. P., Smirnov L. S.* The effect of radiation on semiconductors: Tutorial. Moscow: Nauka, 1988. 182 p. [in Russian].
17. *Sze. S.M.* Physics of Semiconductor Devices. Second Edition. John Wiley and Sons Ltd, 1981.
18. *Pershenkov V.S. et al.* Calculation of surface recombination current in bipolar microelectronic structures subjected to ionizing radiation // Russian Microelectronics. 2009. V. 38. No. 1. P. 17–29.

УДК 621.314:681.586.7:004.942

ПУЛЬСАЦИИ DC/DC ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ, ПОСТРОЕННОГО ПО SEPIC ТОПОЛОГИИ

© 2024 г. В. К. Битюков¹, *, А. И. Лавренов¹¹Российский технологический университет (РТУ МИРЭА),

Москва, Россия

*E-mail: bitukov@mirea.ru

Поступила в редакцию 17.11.2023 г.

После доработки 01.02.2024 г.

Принята к публикации 05.02.2024 г.

Математические модели являются основой для унифицированных методов расчета и проектирования радиоэлектронных устройств. Разработанная предельная непрерывная математическая модель DC/DC преобразователя, построенного по топологии SEPIC, позволяет оценить диапазон изменения токов, протекающих через обмотки дросселей, и напряжений на обкладках конденсаторов, а также определить их максимальные и минимальные значения при различных параметрах преобразователя, таких как частота коммутации силового ключа, коэффициент заполнения, номиналы элементов и т.д. Результаты исследований показали, что фазовые координаты математической модели стремятся к реальным значениям токов и напряжений преобразователя при частоте коммутации силового ключа более 200 кГц. Было установлено соответствие между расчетными значениями размахов пульсаций и результатами, полученными при моделировании (при изменении коэффициента заполнения и частоты коммутации силового ключа).

Ключевые слова: преобразователь, DC/DC, SEPIC топология, математическая модель, пульсации токов и напряжений, частота коммутации, коэффициент заполнения, номиналы элементов, расчет, моделирование

DOI: 10.31857/S0544126924020056

1. ВВЕДЕНИЕ

Автономность наукоемких радиоэлектронных устройств является одной из основных тенденций развития техники. Как правило, в автономных устройствах энергообеспечение выполняется с помощью литий-ионных аккумуляторов и/или топливных ячеек. Специфика этих устройств заключается в использовании стабилизированных низковольтных напряжений. Для формирования стабильного напряжения необходимой величины применяют DC/DC преобразователи [1], так как напряжение первичных источников напряжения со временем изменяется в широком диапазоне [2, 3]. Эти особенности диктуют потребность в разработке различных средств расчета и проектирования DC/DC преобразователей.

На настоящее время DC/DC преобразователи без гальванической развязки насчитывают шесть топологий: понижающего типа (buck converter), повышающего типа (boost converter), полярно-инвертирующего типа (buck-boost converter), SEPIC,

Ćuk и Zeta. Первые три топологии исследованы достаточно подробно, в отличие остальных преобразователей понижающе-повышающего типа [4, 5]. А вот DC/DC преобразователи, построенные по топологии SEPIC, Ćuk и Zeta, требуют дополнительных исследований и разработки соответствующих методов расчета и проектирования.

Разработка радиоэлектронных устройств базируется на соответствующих математических моделях. Для базовых DC/DC преобразователей топологий buck converter, boost converter и buck-boost converter уже созданы предельные непрерывные математические модели [6]. DC/DC преобразователи понижающе-повышающего типа, построенные по топологиям SEPIC [7], Ćuk [8] и Zeta [9, 10], тоже описаны с помощью предельных непрерывных математических моделей. Но если для топологий Ćuk [8] и Zeta [9, 10] выполнен анализ пульсаций токов, протекающих через обмотки дросселей, и напряжений на конденсаторах, то для топологии SEPIC подобный анализ отсутствует.

2. АНАЛИТИЧЕСКИЙ ВЫВОД УРАВНЕНИЙ, ОПИСЫВАЮЩИХ РАЗМАХИ ПУЛЬСАЦИЙ ТОКОВ И НАПРЯЖЕНИЙ

Процедура разработки предельной непрерывной математической модели DC/DC преобразователя, построенного по топологии SEPIC (рис. 1), подробно рассмотрена в [7]. Поэтому в данной работе сохранена преемственность в обозначениях физических величин и электрорадиоэлементов с [7].

Мгновенные токи i_{L1} и i_{L2} , протекающие через обмотки дросселей $L1$ и $L2$, и мгновенные напряжения u_{C1} и u_{C2} на конденсаторах $C1$ и $C2$ содержат постоянную и переменную составляющие. Поэтому можно записать, что

$$\begin{aligned} i_{L1} &= I_{L1} + \delta i_{L1}, & u_{C1} &= U_{C1} + \delta u_{C1}; \\ i_{L2} &= I_{L2} + \delta i_{L2}, & u_{C2} &= U_{C2} + \delta u_{C2}, \end{aligned} \quad (1)$$

где δi_{L1} — переменная составляющая тока i_{L1} ; δi_{L2} — переменная составляющая тока i_{L2} ; δu_{C1} — переменная составляющая напряжения u_{C1} ; δu_{C2} — переменная составляющая напряжения u_{C2} .

Подставив из (1) уравнения, определяющие мгновенные токи и напряжения, в системы уравнений (6) и (13) из [7], описывающие обе фазы работы преобразователя, а также приняв во внимание, что постоянные составляющие токов и напряжений, как правило, много больше размахов соответствующих пульсаций [10], получают:

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d\delta i_{L1}}{dt} &= \frac{U_{BX}}{L1} - \frac{r_1}{L1} I_{L1}, \\ \frac{d\delta i_{L2}}{dt} &= -\frac{1}{L2} U_{C1} - \frac{r_2}{L2} I_{L2}, \\ \frac{d\delta u_{C1}}{dt} &= \frac{1}{C1} I_{L2}, \\ \frac{d\delta u_{C2}}{dt} &= \frac{1}{R_H C2} U_{C2}. \end{aligned} \right. \quad (2)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d\delta i_{L1}}{dt} &= \frac{U_{BX}}{L1} - \frac{r_1}{L1} I_{L1} + \frac{1}{L1} U_{C1} + \frac{1}{L1} U_{C2}, \\ \frac{d\delta i_{L2}}{dt} &= \frac{1}{L2} U_{C2} - \frac{r_2}{L2} I_{L2}, \\ \frac{d\delta u_{C1}}{dt} &= -\frac{1}{C1} I_{L1}, \\ \frac{d\delta u_{C2}}{dt} &= -\frac{1}{C2} I_{L1}. \end{aligned} \right. \quad (3)$$

Используя уравнения системы (2), получают формулы для определения переменных составляющих δi_{L1} , δi_{L2} , δu_{C1} и δu_{C2} за время первой фазы:

$$\delta i_{L1} = \int \left(\frac{U_{BX}}{L1} - \frac{r_1}{L1} I_{L1} \right) dt = \left(\frac{U_{BX}}{L1} - \frac{r_1}{L1} I_{L1} \right) t; \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \delta i_{L2} &= \int \left(-\frac{1}{L2} U_{C1} - \frac{r_2}{L2} I_{L2} \right) dt = \\ &= \left(-\frac{1}{L2} U_{C1} - \frac{r_2}{L2} I_{L2} \right) t; \end{aligned} \quad (5)$$

$$\delta u_{C1} = \int \left(\frac{1}{C1} I_{L2} \right) dt = \left(\frac{1}{C1} I_{L2} \right) t; \quad (6)$$

$$\delta u_{C2} = \int \left(\frac{1}{R_H C2} U_{C2} \right) dt = \left(\frac{1}{R_H C2} U_{C2} \right) t. \quad (7)$$

Используя уравнения системы (3), получают формулы для определения переменных составляющей δi_{L1} , δi_{L2} , δu_{C1} и δu_{C2} за время второй фазы:

$$\begin{aligned} \delta i_{L1} &= \int \left(\frac{U_{BX}}{L1} - \frac{r_1}{L1} I_{L1} + \frac{1}{L1} U_{C1} + \frac{1}{L1} U_{C2} \right) dt = \\ &= \left(\frac{U_{BX}}{L1} - \frac{r_1}{L1} I_{L1} + \frac{1}{L1} U_{C1} + \frac{1}{L1} U_{C2} \right) t; \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \delta i_{L2} &= \int \left(\frac{1}{L2} U_{C2} - \frac{r_2}{L2} I_{L2} \right) dt = \\ &= \left(\frac{1}{L2} U_{C2} - \frac{r_2}{L2} I_{L2} \right) t; \end{aligned} \quad (9)$$

$$\delta u_{C1} = \int \left(-\frac{1}{C1} I_{L1} \right) dt = \left(-\frac{1}{C1} I_{L1} \right) t; \quad (10)$$

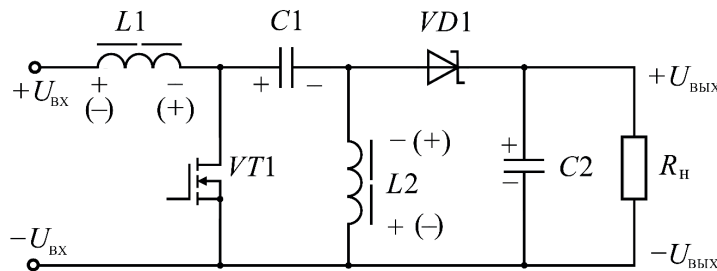


Рис. 1. Принципиальная электрическая схема преобразователя понижающе-повышающего типа, построенного по топологии SEPIC.

$$\delta u_{C2} = \int \left(-\frac{1}{C2} I_{L1} \right) dt = \left(-\frac{1}{C2} I_{L1} \right) t. \quad (11)$$

Используя уравнения (4)–(7), получают формулы для определения размаха пульсаций Δi_{L1} , Δi_{L2} , Δu_{C1} и Δu_{C2} за время первой фазы:

$$\Delta i_{L1} = |\delta i_{L1}(TD) - \delta i_{L1}(0)| = \left| \frac{U_{BX} r_1 D^3}{f L1 \left((D^2 - 2D + 1)r_2 + D^2 r_1 + (2R_H D - R_H D^2 - R_H) \right)} + \frac{U_{BX} D}{f L1} \right|; \quad (12)$$

$$\Delta i_{L2} = |\delta i_{L2}(TD) - \delta i_{L2}(0)| = \left| \frac{U_{BX} r_1 D^3}{f L2 \left((D^2 - 2D + 1)r_2 + D^2 r_1 + (2R_H D - R_H D^2 - R_H) \right)} + \frac{U_{BX} D}{f L2} \right|; \quad (13)$$

$$\Delta u_{C1} = |\delta u_{C1}(TD) - \delta u_{C1}(0)| = \left| \frac{U_{BX} D^2 (D - 1)}{f C1 \left((D^2 - 2D + 1)r_2 + D^2 r_1 + (2R_H D - R_H D^2 - R_H) \right)} \right|; \quad (14)$$

$$\Delta u_{C2} = |\delta u_{C2}(TD) - \delta u_{C2}(0)| = \left| \frac{U_{BX} D^2 (D - 1)}{f C2 \left((D^2 - 2D + 1)r_2 + D^2 r_1 + (2R_H D - R_H D^2 - R_H) \right)} \right|. \quad (15)$$

Используя выражения (8)–(11), получают формулы для определения размаха пульсаций Δi_{L1} , Δi_{L2} , Δu_{C1} и Δu_{C2} за время второй фазы:

$$\Delta i_{L1} = |\delta i_{L1}(T) - \delta i_{L1}(TD)| = \left| \frac{U_{BX} D \left((D^2 - 2D)r_1 + 2R_H D^2 - 4R_H D + 2R_H \right)}{f L1 \left((D^2 - 2D + 1)r_2 + D^2 r_1 + (2R_H D - R_H D^2 - R_H) \right)} + \frac{U_{BX} D}{f L1} \right|; \quad (16)$$

$$\Delta i_{L2} = |\delta i_{L2}(T) - \delta i_{L2}(TD)| = \left| \frac{U_{BX} r_1 D^3}{f L2 \left((D^2 - 2D + 1)r_2 + D^2 r_1 + (2R_H D - R_H D^2 - R_H) \right)} + \frac{U_{BX} D}{f L2} \right|; \quad (17)$$

$$\Delta u_{C1} = |\delta u_{C1}(T) - \delta u_{C1}(TD)| = \left| \frac{U_{BX} D^2 (D - 1)}{f C1 \left((D^2 - 2D + 1)r_2 + D^2 r_1 + (2R_H D - R_H D^2 - R_H) \right)} \right|; \quad (18)$$

$$\Delta u_{C2} = |\delta u_{C2}(T) - \delta u_{C2}(TD)| = \left| \frac{U_{BX} D^2 (D - 1)}{f C2 \left((D^2 - 2D + 1)r_2 + D^2 r_1 + (2R_H D - R_H D^2 - R_H) \right)} \right|. \quad (19)$$

Уравнения (12)–(15) первой фазы эквивалентны уравнениям (16)–(19) второй фазы, так как средние значения токов и напряжений со временем не изменяются. Поэтому изменения мгновенных значений токов и напряжений по модулю в первой фазе будут равны их изменению по модулю во второй фазе. В дальнейшем для упрощения сбора данных в качестве уравнений для расчета использованы формулы (12)–(15).

Таким образом, зная номиналы выбранных элементов электронной компонентной базы и режим работы преобразователя (коэффициент

заполнения D и период T), формулы (12)–(15) позволяют рассчитать размах пульсации токов i_{L1} , i_{L2} , протекающих через обмотки дросселей $L1$ и $L2$, и напряжений u_{C1} , u_{C2} на обкладках конденсаторов $C1$ и $C2$ соответственно.

3. МОДЕЛИРОВАНИЕ В СРЕДЕ MULTISIM

Проверка достоверности полученных выражений для расчета размахов пульсаций токов и напряжений выполнена сравнением результатов расчета по формулам (12)–(15) с результатами схемотехнического моделирования в среде Multisim.

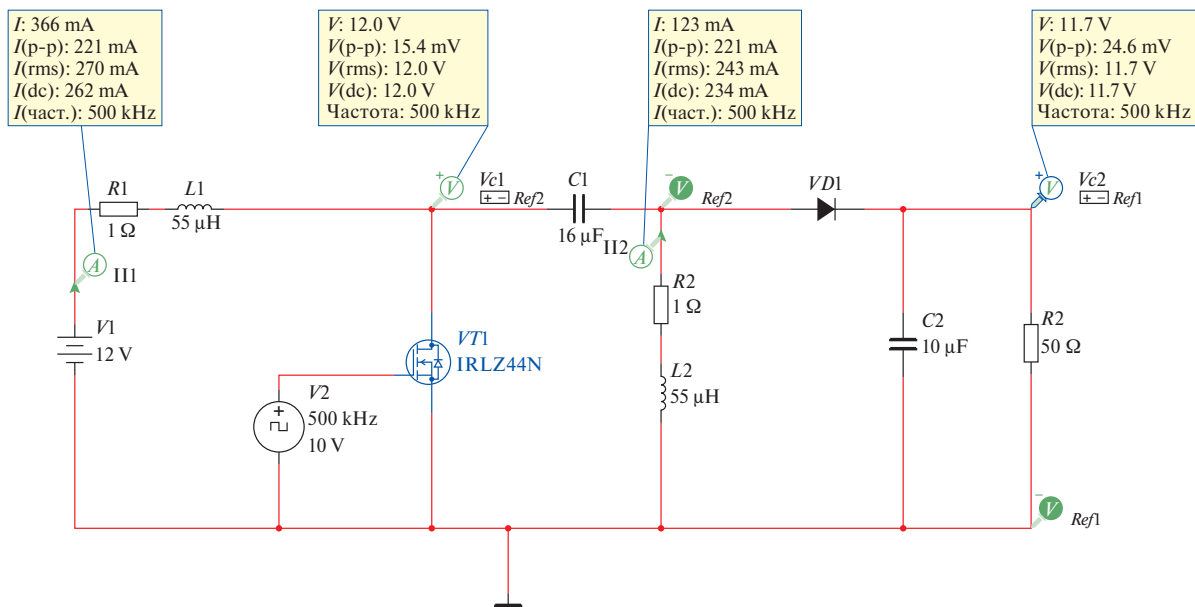
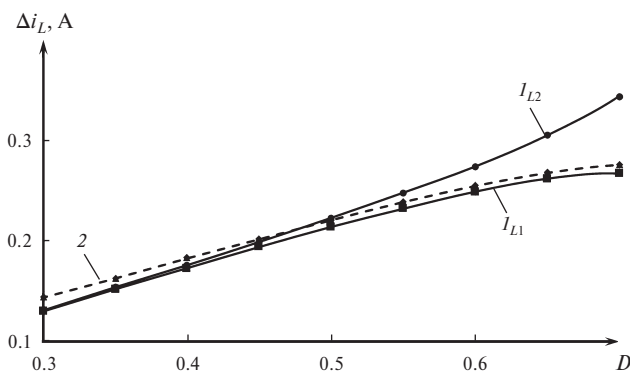
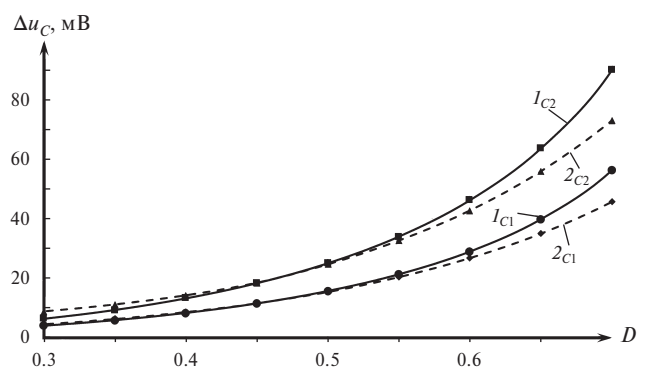


Рис. 2. Схема моделирования DC/DC преобразователя.


 Рис. 3. Влияние коэффициента заполнения на пульсации токов, протекающих через обмотки дросселей $L1$ и $L2$: I_{L1} — расчетные значения Δi_{L1} ; I_{L2} — расчетные значения Δi_{L2} ; 2 — результаты моделирования Δi_{L1M} и Δi_{L2M} .

 Рис. 4. Влияние коэффициента заполнения на пульсации напряжения на конденсаторах $C1$ и $C2$: I_{C1} — расчетное значение Δu_{C1} ; 2_{C1} — результат моделирования Δu_{C1M} ; I_{C2} — расчетное значение Δu_{C2} ; 2_{C2} — результат моделирования Δu_{C2M} .

Аналитический вывод уравнений для расчета постоянных составляющих SEPIC преобразователя и их сравнение с результатами моделирования представлены в [10].

На рис. 2 показана схема моделирования DC/DC преобразователя. В качестве силового транзистора был использован MOSFET IRLZ44N (как и в [11]), который использован для коммутации тока от входного источника питания $V1$ с заданной частотой f тактовых импульсов, создаваемых генератором $V2$. Все компоненты схемы выбраны из базы данных Multisim. Дроссели

представлены эквивалентными схемами. Активные сопротивления выбранных дросселей, имеющих индуктивность 55 мкГн , не превышали 1 Ом .

Для исследования влияния коэффициента заполнения D на размах пульсаций был использован режим анализа переходных процессов. Размах пульсаций токов и напряжений регистрировался в установившемся режиме (через $5\text{--}12 \text{ мс}$ после начала моделирования). Результаты исследования, показывающие влияние коэффициента заполнения D , как основного параметра, на режим работы преобразователя, представлены на рис. 3

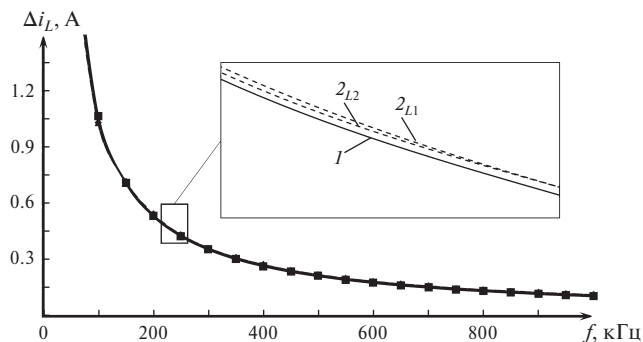


Рис. 5. Влияние частоты коммутации силового транзистора на размахы пульсаций токов, протекающих через обмотку дросселей $L1$ и $L2$ при коэффициенте заполнения, равном 0.5: 1 — расчетное значение Δi_L ; 2 $_{L1}$ — результат моделирования $\Delta i_{L1м}$; 2 $_{L2}$ — результат моделирования $\Delta i_{L2м}$.

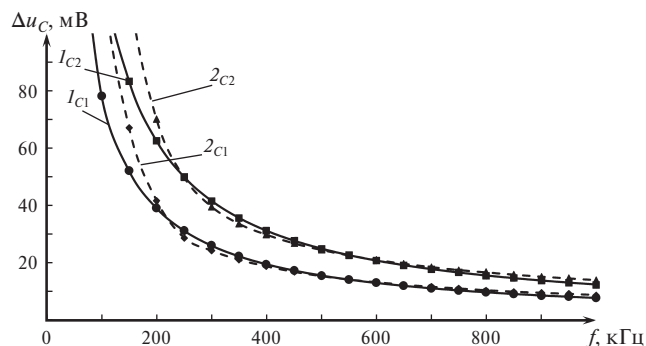


Рис. 6. Влияние частоты коммутации силового транзистора на размахы пульсаций напряжения на конденсаторах $C1$ и $C2$ при коэффициенте заполнения, равном 0.5: 1 $_{C1}$ — расчетное значение Δu_{C1} ; 2 $_{C1}$ — результат моделирования $\Delta u_{C1м}$; 1 $_{C2}$ — расчетное значение Δu_{C2} ; 2 $_{C2}$ — результат моделирования $\Delta u_{C2м}$.

и рис. 4 (сплошные линии — расчет, штриховые линии — моделирование).

Здесь и далее приняты обозначения: Δi_L — размахы пульсаций тока, протекающего через обмотку дросселей $L1$ и $L2$, полученные с помощью предельной непрерывной математической модели; Δu_C — пульсации напряжения на конденсаторах $C1$ и $C2$, полученные с помощью предельной непрерывной математической модели; $\Delta i_{Lм}$ — размахы пульсаций тока, протекающего через обмотку дросселей $L1$ и $L2$, полученные с помощью моделирования; $\Delta u_{Cм}$ — пульсации напряжения на конденсаторах $C1$ и $C2$, полученные с помощью моделирования.

Информация, приведенная на рис. 3 и рис. 4, иллюстрирует достаточно хорошее совпадение результатов моделирования с результатами расчетов

по разработанной математической модели. Однако при значениях коэффициента заполнения D менее 0.3 и более 0.7 наблюдаются существенные отличия. Это объясняется допущениями, принятыми при выводе формул (23)—(30) [7], и влиянием паразитных параметров электрорадиоэлементов на работу преобразователя. В окрестности коэффициента заполнения $D = 0.5$ наблюдаются практически тождественные значения размахов пульсаций токов и напряжений, полученных при расчете и моделировании.

На рис. 3 и рис. 4 видно, что минимальная разница между рассчитанными значениями и результатами моделирования наблюдаются при коэффициентах заполнения D от 0.45 до 0.60. Для Δi_{L1} минимальная разница составляет 6 мА (2.2% от $\Delta i_{L1м}$) при $D = 0.60$, для Δi_{L2} — 2 мА (0.9% от $\Delta i_{L2м}$) при $D = 0.50$, для Δu_{C1} — 0.2 мВ (1.5% от $\Delta u_{C1м}$) при $D = 0.50$. Разница Δu_{C2} — 0.1 мВ (0.63% от $\Delta u_{C2м}$) при $D = 0.45$.

При изменении коэффициента заполнения D относительно минимума разница между расчетными значениями и значениями, полученными при моделировании, увеличивается. Так, для Δi_{L1} разница составляет 14 мА (10%) и 9 мА (3%), для Δi_{L2} — 13 мА (9%) и 68 мА (24%), для Δu_{C1} — 0.62 мВ (14%) и 10.55 мВ (23%), а для Δu_{C2} — 2.4 мВ (28%) и 17 мВ (23%), при коэффициентах заполнения D равных 0.3 и 0.7 соответственно.

Результаты исследования влияния частоты коммутации f силового транзистора $VT1$ на размахы пульсаций токов и напряжений представлены на рис. 5 и рис. 6.

На рис. 6 хорошо видна предельность непрерывной математической модели [8, 10] при частоте менее 200 кГц.

Расхождение результатов расчета и моделирования размахов пульсаций токов Δi_{L1} достигает 86 мА (4.2% от $\Delta i_{L1м}$) и 217 мА (10% от $\Delta i_{L2м}$) для Δi_{L2} , а отличия значений размахов пульсаций напряжений Δu_{C1} достигают 312 мВ (66.7% от $\Delta u_{C1м}$) и 421 мВ (62.7% от $\Delta u_{C2м}$) для Δu_{C2} .

При частоте коммутации f силового транзистора рассматриваемого DC/DC преобразователя, превышающей 200 кГц, минимальные отклонения для пульсаций тока Δi_{L1} наблюдаются на частоте 250 кГц и составляют 7 мА (1.6%), пульсации тока Δi_{L2} совпадают с $\Delta i_{L2м}$ на частоте 650 кГц, а для пульсаций напряжения Δu_{C1} — 5 мкВ (0.03%) на частоте 550 кГц и для Δu_{C2} — 27 мкВ (0.12%) на частоте 550 кГц.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Составлены эквивалентные схемы для DC/DC преобразователя, построенного по

топологии SEPIC, в режимах накопления и передачи энергии. В соответствии с правилами Кирхгофа были записаны системы уравнений для обеих фаз работы устройства. Для формулировки математической модели в матричном виде системы уравнений были преобразованы в матричный вид.

Представляя мгновенные токи и напряжения как суммы постоянной и переменной составляющих, были записаны системы уравнений, описывающие работу преобразователя в режимах накопления и передачи энергии. Используя полученные выражения для постоянных составляющих токов и напряжений и проинтегрировав системы уравнений, описывающие каждую фазу, впервые сформулированы уравнения для определения пульсаций токов, протекающих через обмотку дросселей, и напряжений на конденсаторах, основанные на предельной непрерывной математической модели.

Для проверки достоверности расчетов размахов пульсаций выполнено сравнение результатов, полученных с использованием предельной непрерывной математической модели, с результатами моделирования DC/DC преобразователя. Исследовано влияние коэффициента заполнения D и частоты переключения f силового транзистора на размахи пульсаций характерных токов и напряжений. При коэффициенте заполнения D , близком к 0.5 размаха пульсации, вычисленные с помощью математической модели, совпали с результатами моделирования.

Минимальное расхождение результатов расчета и моделирования при изменении коэффициента заполнения D составляет: 6 мА (2.2%) для Δi_{L1} , 2 мА (0.9%) для Δi_{L2} , 0.2 мВ (1.5%) для Δu_{C1} и 0.1 мВ (0.63%) для Δu_{C2} . При изменении частоты коммутации f минимальная разница составляет: для Δi_{L1} — 7 мА (1.6%), для Δi_{L2} — 0 мА, для Δu_{C1} — 5 мкВ (0.03%) и для Δu_{C2} — 27 мкВ (0.12%).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шубин В.В. Высоковольтный КМОП преобразователь уровня напряжения для низковольтного технологического процесса // Микроэлектроника. 2022. Т. 51. № 3. С. 202–211. DOI: 10.31857/S0544126922020089. EDN: PELNYF.
2. Бабенко В.П., Битюков В.К., Симачков Д.С. Понижающе-повышающий DC/DC преобразователь с единственной индуктивностью // Микроэлектроника. 2022. Т. 51. № 1. С. 60–70. DOI: 10.31857/S0544126921060041. EDN: ESWIIC.
3. Применение преобразователей постоянного напряжения в составе энергетической установки электрического транспортного средства / В.Е. Ютт, В.В. Лохнин, К.М. Сидоров, К.Х. Гулямов // Вестник Московского автомобильно-дорожного государственного технического университета (МАДИ). 2015. № 4(43). С. 34–40. EDN: UYSEBH.
4. Битюков В.К., Симачков Д.С., Бабенко В.П. Схемотехника электропреобразовательных устройств: Учебник для студентов, обучающихся по направлениям бакалавриата 11.03.01 “Радиотехника”, 11.03.02 “Инфокоммуникационные технологии и системы связи”, 11.03.03 “Конструирование и технология электронных средств”, магистратуры 11.04.01 “Радиотехника”, а также по специальности специалитета 11.05.01 “Радиоэлектронные системы и комплексы”, для углубленного изучения дисциплины “Схемотехника электронных устройств”. Вологда: Инфра-Инженерия, 2023. 384 с.
5. Мыслимов Д.А. Математическое моделирование понижающего DC/DC-преобразователя в среде NI Multisim // Перспективы науки. 2023. № 3(162). С. 80–83. EDN: EEPFUZ.
6. Коршунов А. Методика построения непрерывных моделей импульсных преобразователей напряжения постоянного тока // Компоненты и технологии. 2006. № 8(61). С. 124–130. EDN: MTFMUV.
7. Лавренов А.И., Битюков В.К. Математическая модель DC/DC-преобразователя, построенного по топологии SEPIC // Russian Technological Journal. 2024. № 1. С. 48–58.
8. Коршунов А. Импульсный преобразователь напряжения постоянного тока по схеме Чука // Силовая электроника. 2017. Т. 4. № 67. С. 60–66. EDN: ZQLXRR.
9. Битюков В.К., Лавренов А.И., Малицкий Д.А. Математическая модель DC/DC преобразователя, построенного по Zeta топологии (часть 1) // Проектирование и технология электронных средств. 2022. № 4. С. 53–57. EDN: SGUTFI.
10. Битюков В.К., Лавренов А.И., Малицкий Д.А. Математическая модель DC/DC преобразователя, построенного по Zeta топологии (часть 2) // Проектирование и технология электронных средств. 2023. № 1. С. 48–53. EDN: VXPIIR.
11. Бабенко В.П., Битюков В.К. Энергетические и шумовые характеристики конверторного преобразователя SEPIC/Cuck с биполярным выходом // Микроэлектроника. 2021. Т. 50. № 5. С. 394–400. DOI: 10.31857/S0544126921040025. EDN: SGUPMB.

RIPPLE OF A DC/DC CONVERTER BASED ON SEPIC TOPOLOGY

© 2024 V. K. Bitukov¹, *, A. I. Lavrenov¹

¹*Russian Technological University (RTU MIREA)
Moscow, Russia*

**E-mail: bitukov@mirea.ru*

Mathematical models serve as the basis for unified methods for the calculation and designing of radio-electronic devices. The developed limiting continuous mathematical model of a DC/DC converter, built using SEPIC topology, allows to determine the range of changes in currents flowing through the inductor windings and voltages on the capacitor plates, as well as to determine their maximum and minimum values for various converter parameters, such as switching frequency of the power switch, fill factor, element ratings, etc. The research results have shown that the phase coordinates of the mathematical model tend to the real values of currents and voltages of the converter when the switching frequency of the power switch is more than 200 kHz. Correspondence is established between the calculated values of the pulsation ranges and the results obtained during modelling (with changes in the filling factor and switching frequency of the power switch).

Keywords: converter, DC/DC, SEPIC, topology, mathematical model, current and voltage ripple, switching frequency, fill factor, element ratings, calculation, modelling

REFERENCES

1. *Shubin V.V.* A high voltage CMOS voltage level converter for a low voltage process // *Russian Microelectronics*. 2022. V. 51. No. 3. P. 155–163.
2. *Babenko V.P., Bitukov V.K., Simachkov D.S.* DC/DC Buck-Boost Converter with Single Inductance // *Russian Microelectronics*. 2022. V. 51. No. 1. P. 60–70. DOI: 10.31857/S0544126921060041. EDN: ESWIIC.
3. The use of DC-DC converters within the power installation of the electric vehicle / V.E. Yutt, V.V. Lohin, K.M. Sidorov, K.H. Gulyamov // *Vestnik MADI* (in Russian). 2015. No. 4(43). P. 34–40. EDN: UYSEBH.
4. *Bitukov V.K., Simachkov D.S., Babenko V.P.* Circuitry of electric power converters: Textbook for undergraduate students specialized in 11.03.01 — Radio engineering, 11.02.03 — Infocommunication technologies and communication systems, 11.03.03 — Design and technology of electronic means; for Master's students: 11.04.01 — Radio engineering; for students in the specialty 11.05.01 — Radio electronic systems and complexes; for in-depth study of the discipline "Circuitry of electronic devices". Vologda: Infra-Engineering, 2023. 384 p.
5. *Myslimov D.A.* Mathematical Modeling of a DC/DC Buck Converter in NI // *Science Prospects*. 2023. No. 3(162). P. 80–83. EDN: EEPFUZ.
6. *Korshunov A.* Methodology for constructing continuous models of pulsed DC voltage converters // *Components and Technologies*. 2006. No. 8(61). P. 124–130. EDN: MTFMUV.
7. *Lavrenov A.I., Bitukov V.K.* Mathematical model of a DC/DC converter based on SEPIC topology // *Russian Technological Journal*. 2024. V. 12. No. 1. P. 69–79.
8. *Korshunov A.* Pulsed DC voltage converter based on the Chuk scheme // *Silovaya Elektronika* [in Russian]. 2017. V. 4. No. 67. P. 60–66. EDN: ZQLXRR.
9. *Bitukov V.K., Lavrenov A.I., Malitsky D.A.* Mathematical model of a DC/DC converter based on SEPIC topology. (Part 1) // *Design and Technology of Electronic Means*. 2022. No. 4. P. 53–57. EDN: SGUTFI.
10. *Bitukov V.K., Lavrenov A.I., Malitsky D.A.* Mathematical model of a DC/DC converter based on SEPIC topology (Part 2) // *Design and Technology of Electronic Means*. 2023. No. 1. P. 48–53. EDN: VXPIIR.
11. *Babenko V.P., Bitukov V.K.* Energy and noise characteristics of a SEPIC/CIK converter with bipolar output // *Russian Microelectronics*. 2021. V. 50. No. 5. P. 357–363. DOI: 10.31857/S0544126921040025. EDN: SGUPMB.

ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСИ НИКЕЛЯ НА ЭКСПЛУАТАЦИОННЫЕ ПАРАМЕТРЫ КРЕМНИЕВОГО СОЛНЕЧНОГО ЭЛЕМЕНТА

© 2024 г. З. Т. Кенжаев¹*, Н. Ф. Зикриллаев¹, В. Б. Оджаев²,
К. А. Исмаилов³, В. С. Просолович², Х. Ф. Зикриллаев¹, С. В. Ковешников¹

¹Ташкентский государственный технический университет,
Ташкент, Узбекистан

²Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

³Каракалпакский государственный университет, Нукус, Узбекистан

*E-mail: zoir1991@bk.ru

Поступила в редакцию 22.12.2023 г.

После доработки 01.02.2024 г.

Принята к публикации 05.02.2024 г.

Представлены результаты исследований влияния примеси никеля, введенного методом диффузии в монокристаллический кремний, на характеристики солнечных элементов. Установлено, что легирование атомами никеля позволяет увеличить время жизни неосновных носителей заряда в материале до 2 раз, а эффективность солнечных элементов на 20–25%. Показано, что распределение кластеров никеля в объеме материала является практически однородным, а их размер не превышает 0.5 мкм. Концентрация кластеров в объеме составляет $\sim 10^{11}–10^{13} \text{ см}^{-3}$, а в приповерхностном слое — $\sim 10^{13}–10^{15} \text{ см}^{-3}$. Выявлены физические механизмы влияния “объемных” и “приповерхностных” кластеров атомов никеля на эффективность кремниевых солнечных элементов. Экспериментально установлено, что в повышении их эффективности определяющую роль играют процессы геттерирования кластерами никеля рекомбинационно-активных технологических примесей, происходящие в обогащенной никелем лицевой приповерхностной области солнечных элементов.

Ключевые слова: кремниевый солнечный элемент, диффузия, кластеры никеля, рекомбинационные центры, геттерирование

DOI: 10.31857/S0544126924020061

1. ВВЕДЕНИЕ

В современном промышленном производстве наблюдается тенденция увеличения доли солнечных элементов (СЭ), изготовленных на основе “солнечного кремния”, что обусловлено его относительной дешевизной [1]. Однако “солнечный кремний” имеет меньшее время жизни неосновных носителей заряда (ННЗ) вследствие наличия в нем достаточно высокого содержания технологических примесей (Fe, Cu, Au, Cr и т.д.), что затрудняет получение высокого коэффициента полезного действия солнечных элементов, изготовленных на его основе [2].

Для повышения эффективности СЭ на основе “солнечного кремния” необходимо, прежде всего, увеличить время жизни фотогенерируемых носителей заряда (τ) [3], а также уменьшить оптические и электрические потери энергии [4, 5]. Увеличение τ неосновных носителей заряда (ННЗ) в солнечных элементах возможно путем геттерирования неконтролируемых примесных атомов. Одним из

перспективных методов является введение в материал кластеров атомов никеля [6–9]. Известно [10, 11], что распределение концентрации атомов никеля после проведения диффузии имеет существенную неоднородность — высокая приповерхностная концентрация, достаточно быстро спадающая вглубь, и сравнительно постоянная ее величина в объеме.

В работах [12, 13] показано, что диффузионное легирование атомами никеля с лицевой стороны солнечного элемента с глубоко залегающим p – n -переходом приводит к увеличению его эффективности. Однако в настоящее время неясны физические механизмы влияния кластеров атомов никеля, в том числе находящихся в приповерхностной области, на эксплуатационные параметры кремниевых СЭ. Исследование влияния кластеров примесных атомов никеля на параметры кремниевого солнечного элемента представляет большой практический интерес в силу технологических особенностей легирования никелем [14–17]. Целью

работы являлось установление влияния атомов никеля, находящихся как в объеме, так и в приповерхностном обогащенном слое, на эффективность кремниевых СЭ.

2. МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Для исследований использовались полированные кремниевые пластины монокристаллического кремния, выращенного по методу Чохральского, марки КДБ-0.5 толщиной 380 мкм. Удельное сопротивление составляло $0.5 \text{ Ом} \times \text{см}$, содержание кислорода (NO) — $\sim 7 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$, плотность дислокаций — не более 10^2 см^{-2} , время жизни ННЗ — $\tau > 6 \text{ мкс}$. Слой чистого никеля толщиной 1 мкм напылялся в вакууме. Диффузия никеля проводилась в интервале температур $T_{\text{дифф}} = 750\text{--}1250^\circ\text{C}$ в течение $t = 30 \text{ мин}$ на воздухе. После диффузии для активации процесса геттерирования неконтролируемых рекомбинационно-активных примесей осуществлялся дополнительный термический отжиг на воздухе в интервале температур $T_{\text{отж}} = 600\text{--}1100^\circ\text{C}$ в течение $t = 30 \text{ мин}$ [18–20]. После каждой технологической операции проводились очистка поверхности и химическая обработка пластин (10% HCl, 10% HF) в целях удаления остатков никеля и оксида кремния с поверхности.

Распределение атомов никеля в приповерхностном слое кремния измерялись с помощью масс-спектрометра CAMECA IMS-6f Magnetic Sector SIMS (SIMS). Элементный состав кластеров никеля как на поверхности, так и на сколе образца исследовался на сканирующем электронном микроскопе марки TESCAN MIRA3 в режиме рентгеновского локального зондового микроанализа. Скол образцов сканировали с шагом 0.5 мкм, начиная от лицевой стороны (сторона, легированная никелем).

Для изучения влияния атомов никеля на параметры СЭ ($J_{\text{к.з}}$ — плотность тока короткого замыкания, $U_{\text{х.х}}$ — напряжение холостого хода, ξ — коэффициент заполнения вольт-амперной характеристики (ВАХ), P_{max} — максимальная отдаваемая мощность) и время жизни ННЗ были изготовлены СЭ, p – n -переход в которых создавался диффузией фосфора в кремниевые пластины p -типа КДБ 0.5 при $T_{\text{дифф}} = 1000^\circ\text{C}$ в течение $t = 0.5 \text{ ч}$. Глубина залегания p – n -перехода составляла 0.5 мкм. Затем пластины разрезались на отдельные образцы размерами $1 \times 1 \text{ см}^2$. Для исследований формировались три группы СЭ: I группа — контрольные; II группа — тонкий слой чистого никеля толщиной 1 мкм, который напылялся в вакууме на тыльную сторону пластины после проведения диффузии фосфора; III группа — тонкий слой чистого никеля толщиной 1 мкм, напылялся в вакууме на лицевую сторону. Диффузия никеля проводилась в интервале температур $T_{\text{дифф}} = 750\text{--}1250^\circ\text{C}$ в течение

$t = 3\text{--}30 \text{ мин}$. После диффузии фосфора и никеля тыльный слой пластины, обогащенный никелем и фосфором, удалялся шлифовкой на глубину $\sim 10 \text{ мкм}$. Дополнительный геттерирующий термический отжиг проводился при $T_{\text{отж}} = 750\text{--}800^\circ\text{C}$. Вольт-амперные характеристики и время жизни ННЗ в базе СЭ измерялись после формирования никелевого контакта. Просветляющее покрытие на поверхности элементов отсутствовало. Время жизни ННЗ в полученных структурах измерялось методом [21].

Для выявления относительного вклада “поверхностных” и “объемных” атомов никеля на параметры СЭ дополнительно исследовались образцы, в которых диффузия никеля проводилась при $T_{\text{дифф}} = 850^\circ\text{C}$ в течение $t = 30 \text{ мин}$ до формирования p – n -перехода (при этом толщина приповерхностного обогащенного слоя оценивается величиной 2.0–2.5 мкм [11, 13]). После диффузии никеля с лицевой поверхности образцов полировкой удаляли обогащенный Ni поверхностный слой толщиной до 5 мкм. Затем формировался p – n -переход по вышеприведенной технологии и проводился дополнительный термический отжиг при $T_{\text{отж}} = 750\text{--}800^\circ\text{C}$ в течение $t = 30 \text{ мин}$ (группа образцов IV).

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Исследования распределения никеля после проведения диффузии показали, что приповерхностная концентрация никеля может достигать $n_s \sim 4 \times 10^{21} \text{ см}^{-3}$, толщина обогащенного Ni слоя составляет $d \sim 3.25 \text{ мкм}$ (рис. 1). На тыльной стороне также появляется обогащенный слой с концентрацией порядка $n_s \sim 10^{20} \text{ см}^{-3}$, однако небольшой толщины ($d \sim 0.5 \text{ мкм}$). В объеме образцов никель

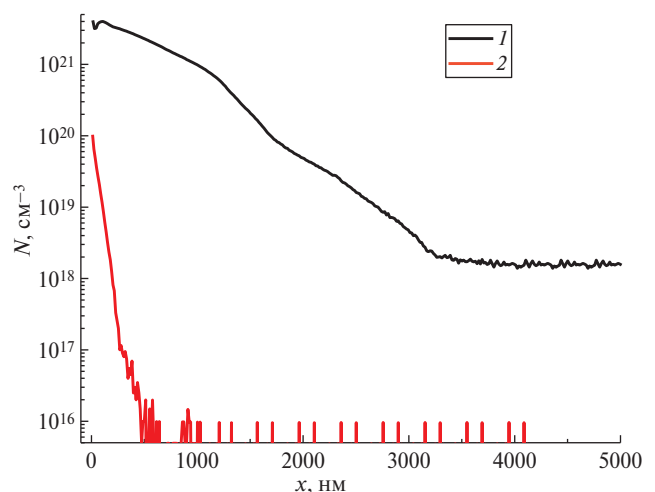


Рис. 1. Распределение атомов никеля в лицевом (1) и тыльном (2) слое кремния после диффузии из металлической пленки никеля, напыленной на лицевую поверхность пластины ($T_{\text{дифф}} = 1200^\circ\text{C}$, $t = 30 \text{ мин}$).

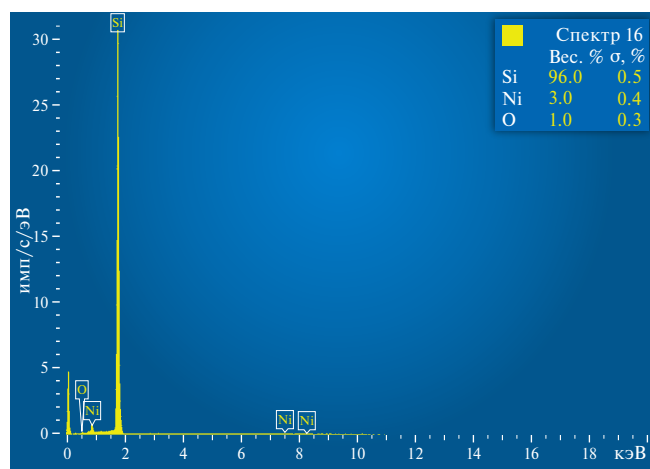


Рис. 2. Элементный состав лицевой поверхности образцов кремния образцов, диффузионно-легированных атомами никеля.

распределен практически однородно (с концентрацией в зависимости от режима диффузии $n_{\text{Ni}} \approx 10^{16} - 2 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$). При этом лицевая поверхность образцов по данным локального рентгеновского зондового микроанализа содержит 96.58 ат.% кремния, 1.44 ат.% никеля и 1.98 ат.% кислорода (рис. 2). Это позволяет констатировать, что на поверхности отсутствуют сплошные пленки силицидов никеля. Экспериментально также установлено, что обогащенный Ni слой сохраняется при последующих термообработках с температурой ниже 900°C , а максимальная концентрация атомов никеля в приповерхностных областях практически не зависит от времени диффузии и слабо зависит от температуры диффузии никеля.

Исследования методом вторичной ионной масс-спектрометрии показали, что диффузионно-введенный никель распределен в кремнии в виде кластеров (рис. 3). При этом средняя поверхностная концентрация атомов Ni составляет $\sim 6 \times 10^{14} \text{ ат/см}^2$. По данным электронной и ИК-микроскопии (рис. 4) установлено, что поверхностная плотность кластеров никеля составляет $\sim 5 \times 10^6 - 10^7 \text{ см}^{-2}$ на лицевой поверхности кремния и $\sim (4-5) \times 10^6 \text{ см}^{-2}$ в объеме (измеренная на сколе образца). Распределение кластеров в объеме практически однородно, их размер не превышает 0.5 мкм (примерно 20–200 нм), это согласуется с результатами работ [22–25]. Рассчитанные на основе полученных данных концентрации кластеров

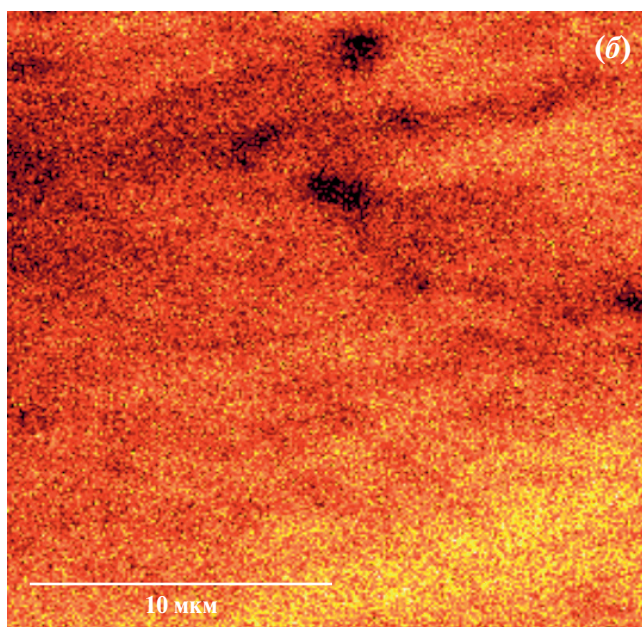
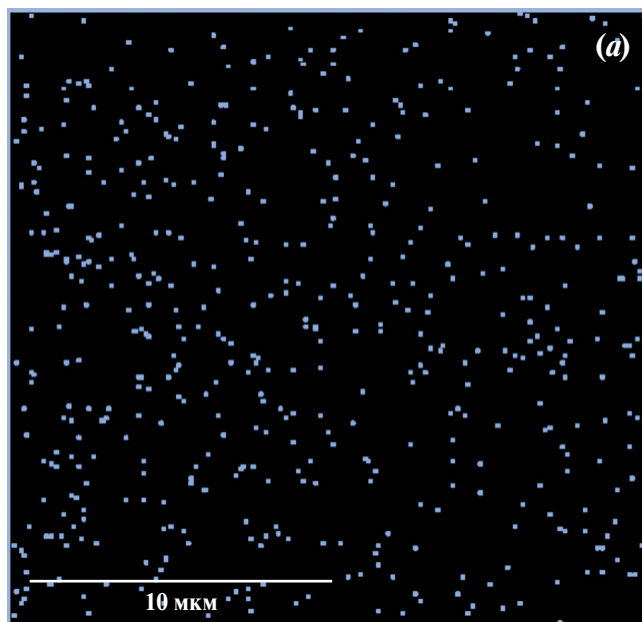


Рис. 3. Снимок поверхности кремния, легированного никелем, полученный методом SIMS для ионов: а — Ni^+ (яркие точки соответствуют скоплениям атомов никеля); б — Si^+ (яркие точки соответствуют кремнию).

в объеме образца составляют $n_k \approx 10^{11} - 10^{13} \text{ см}^{-3}$, в приповерхностной области $n_k \approx 10^{13} - 10^{15} \text{ см}^{-3}$.

Для определения термической стабильности кластеров никеля был проведен дополнительный термический отжиг. Установлено, что при $T_{\text{отж}} = 650 - 800^\circ\text{C}$ происходит увеличение размеров кластеров никеля, а при $T_{\text{отж}} > 900^\circ\text{C}$ кластеры исчезают, т.е. идет распад кластеров. Измерение

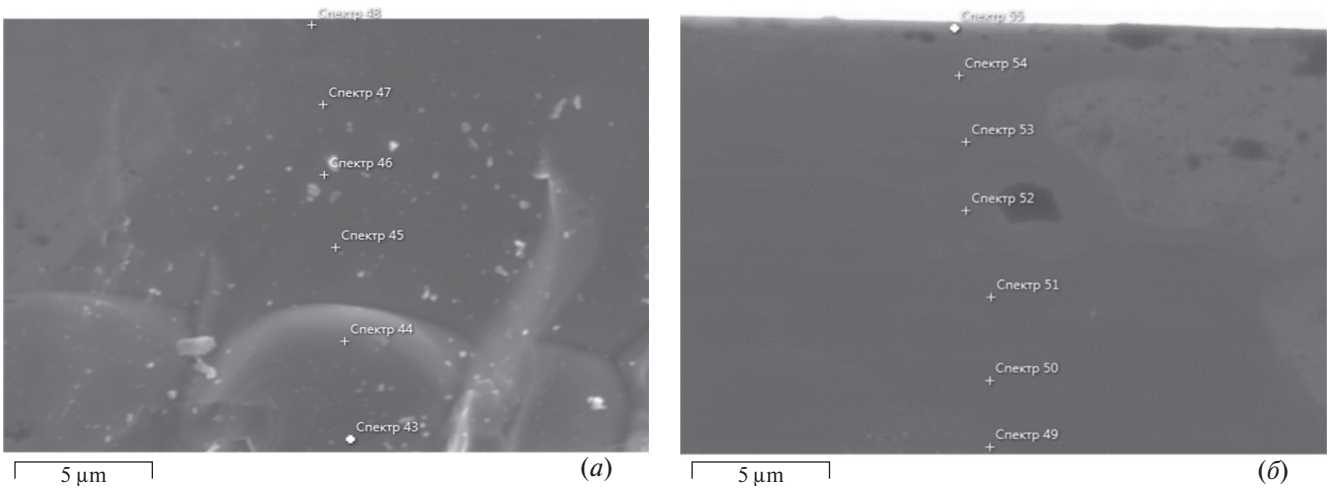


Рис. 4. Изображение точек исследования состава в образцах кремния, легированных никелем, в приповерхностной области (а) и объеме (б) образцов.

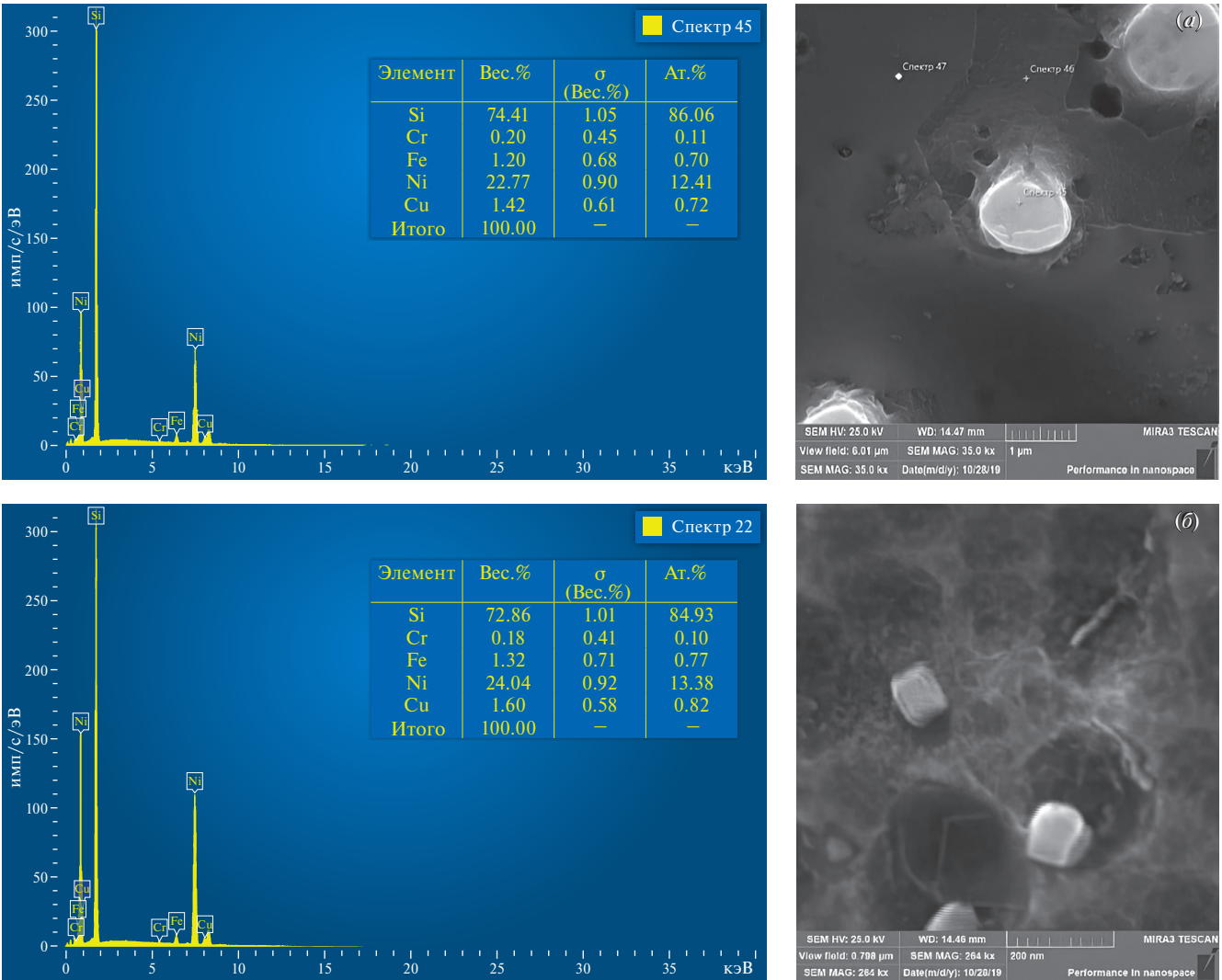


Рис. 5. Изображение и элементный состав “поверхностных” (а) и “объемных” (б) кластеров никеля (получены с помощью рентгеновского локального зондового микроанализа) после дополнительного термического отжига при $T_{отж} = 800^{\circ}\text{C}$.

состава кластеров до проведения термообработок показало, что кластеры на поверхности кремния состоят в основном из атомов кремния — 84.93% и никеля — 13.38%, в их составе имеются также неконтролируемые примеси атомов Cu, Fe, Cr (рис. 5). После проведения дополнительной термообработки ($T_{\text{отж}} = 800^\circ\text{C}$, $t = 30$ мин) концентрация никеля в составе кластера увеличивается до ~40–60%, кислорода — до ~30–35% и быстро диффундирующих примесей (БДП) — до ~30–50% относительно их концентраций до термоотжига. Полученные результаты дают основание констатировать эффективное геттерирование кластерами никеля технологических примесей, которые действуют как центры рекомбинации в кремнии. Следствием этого должно быть значительное увеличение времени жизни ННЗ, в первую очередь за счет формирования высоких концентраций кластеров никеля в приповерхностных слоях.

Исследования влияния диффузионного легирования никелем монокристаллического кремния на время жизни ННЗ показали (табл. 1), что после дополнительного термического отжига τ в контрольных образцах (группа I) практически не изменилось (в исходных оно составляло 5–7 мкс). В то же время в образцах группы II (никель напылялся на тыльную сторону СЭ) среднее значение τ после проведения диффузии никеля увеличивается в 1.35–1.4 раза по сравнению с контрольными образцами. После термического отжига τ увеличивается еще примерно на 20–25%. Суммарное увеличение τ составляет примерно 1.5–1.6 раза относительно контрольных образцов. В группе III (никель напылялся на лицевую сторону) среднее значение τ увеличивается в 1.6–1.7 раза после проведения диффузии никеля

Таблица 1. Время жизни ННЗ всех групп СЭ после проведения диффузии никеля и термоотжига и его изменение для II и III группы относительно параметров I группы

Группа	I	II	III
$T_{\text{дифф}} = 1200^\circ\text{C}$, $t = 30$ мин	Отжиг	Диффузия никеля	
τ , мкс	5–6	7–8	9
$\Delta\tau/\tau_1$, раз	—	1.35–1.4	1.6–1.7
$T_{\text{отж}} = 750\text{--}800^\circ\text{C}$, $t = 1$ ч	Дополнительный термический отжиг		
τ , мкс	5–7	9	12
$\Delta\tau/\tau_1$, раз	1–1.15	1.5–1.55	1.9–2

(при $T_{\text{дифф}} = 1200^\circ\text{C}$). После дополнительного термического отжига происходит дополнительное увеличение τ на 30–35%, т.е. общее увеличение τ составляет 1.9–2 раза относительно контрольных СЭ. Следует отметить, что эффект увеличения времени жизни ННЗ при легировании никелем СЭ не зависит от способа его введения: до или после создания p – n -перехода. На рис. 6 представлены ВАХ СЭ I и III группы (диффузия никеля проводилась до создания p – n -перехода). Видно, что эффективность кремниевого СЭ в результате легирования атомами никеля увеличивается на ~29% по сравнению с контрольным образцом (P_{max} с 12.08 до 15.61 мВт/см² соответственно). Экспериментально установлено, что оптимальной температурой диффузии никеля является $T_{\text{дифф}} = 800\text{--}850^\circ\text{C}$, а температурой дополнительного термического отжига — $T_{\text{отж}} = 750\text{--}800^\circ\text{C}$. Применение

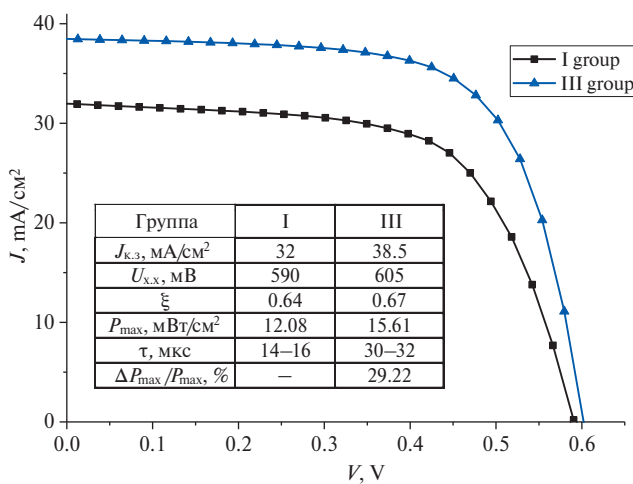


Рис. 6. Вольт-амперные характеристики солнечных элементов и электрофизические параметры (таблица) элементов I и III группы после дополнительного термоотжига при $T_{\text{отж}} = 750\text{--}800^\circ\text{C}$ ($\Delta P_{\text{max}}/P_{\text{max}}$ — относительное изменение максимальной мощности по сравнению с контрольными образцами).

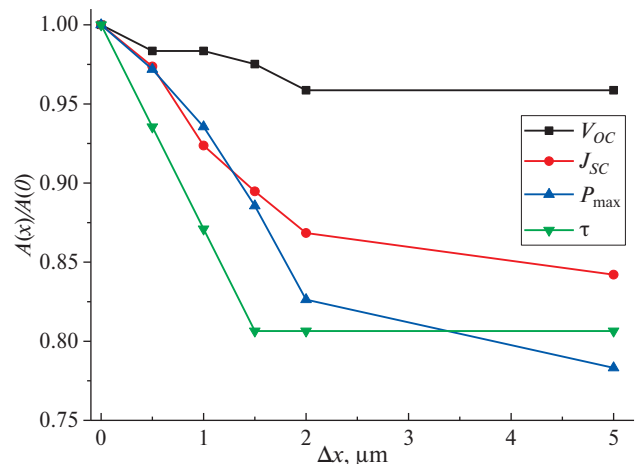


Рис. 7. Изменение $J_{\text{к.з.}}$, $U_{\text{х.х.}}$, P_{max} и τ солнечных элементов в зависимости от толщины удаленного приповерхностного обогащенного никелем слоя относительно СЭ без удаления обогащенного никелем слоя.

данных технологических режимов позволяет повысить эффективность кремниевых СЭ на 25–30%, что согласуется с результатами [14, 15].

В целях установления относительного вклада “поверхностных” и “объемных” кластеров никеля производилось послойное удаление приповерхностного сильнолегированного никелем слоя, сформированного в процессе его диффузии. В данных экспериментах p – n -переход формировался после удаления соответствующей части обогащенного Ni слоя. Как видно из рис. 7, с увеличением толщины удаленного лицевого слоя Δx максимальная снимаемая мощность СЭ III группы уменьшается, после удаления слоя в 5 мкм максимальная мощность падает на ~20–25% по сравнению с аналогичным параметром для образцов с $\Delta x = 0$ мкм. Результаты измерения время жизни ННЗ также показали, что при увеличении толщины удаленного лицевого слоя τ монотонно уменьшается, а после удаления 1.5 мкм практически не изменяется. Следует отметить, что даже после удаления $\Delta x = 5$ мкм значение τ в данных СЭ в 1.6–1.65 раза (24–26 мкс) больше, чем в контрольном солнечном элементе (14–16 мкс). Полученные экспериментальные результаты свидетельствуют о существенном снижении концентрации рекомбинационно-активных центров в солнечных элементах, в которых проводилась диффузия примеси никеля. Это, по всей видимости, обусловлено геттерирующим действием как “объемных”, так и “поверхностных” кластеров никеля. Причем наличие в образцах “поверхностных” кластеров дает более существенный вклад в повышение эффективности СЭ по сравнению с “объемными” кластерами. В связи с этим можно заключить, что повышение эксплуатационных параметров исследовавшихся в настоящей работе солнечных элементов в значительной степени обусловлено геттерирующим действием приповерхностного слоя с концентрацией никеля $n_S \sim 10^{20}–10^{21} \text{ см}^{-3}$ толщиной в несколько микрометров, образующегося в процессе диффузии Ni.

Как известно [26], при создании эмиттера солнечного элемента диффузией фосфора происходит образование “мертвого слоя” вследствие формирования силицидов фосфора. Это приводит, с одной стороны, к повышению сопротивления эмиттерного слоя, а с другой стороны – к снижению времени жизни ННЗ вследствие генерации различных типов дефектов структуры в n^+ -области. В этой связи наличие обогащенного никелем слоя может также оказывать влияние как на время жизни ННЗ, так и на сопротивление лицевого слоя солнечного элемента. Вследствие взаимодействия никеля с фосфором в приповерхностном слое часть его будет исключена из реакций формирования силицидов. Это обусловит уменьшение эффективности рекомбинационных процессов и увеличение подвижности носителей заряда в слое эмиттера за счет

устранения “мертвого” слоя. Уменьшение рекомбинации приводит в росту концентрации оптически генерированных носителей заряда в лицевом слое СЭ и, как следствие, к увеличению коэффициента заполнения ВАХ (ξ). Кроме того, увеличение подвижности в слое эмиттера снизит омические потери, также увеличивая ξ .

Измерение поверхностного сопротивления эмиттера (n^+ -слоя) показало его уменьшение до 15–20% после проведения дополнительного термического отжига. В солнечных элементах, имеющих обогащенную никелем область на лицевой стороне p – n^+ -перехода, коэффициент заполнения ВАХ вырос на 6–7% по сравнению с аналогичной характеристикой для контрольного СЭ.

Следует отметить, что измерения поверхностного сопротивления, произведенные при послойном удалении легированного никелем кремния (до формирования p – n -перехода), показали незначительное влияние никеля на объемное сопротивление кремния. Это позволяет заключить, что в исследуемых образцах основная часть атомов никеля не является электроактивной, что согласуется с результатами работ [9, 25]. Полученные результаты обусловлены взаимодействием электронейтральных атомов примеси никеля, находящихся в междоузельном положении или кластерах, с технологическими примесями.

4. ОБСУЖДЕНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Как было сказано выше, атомы никеля, введенные в объем монокристаллического кремния методом диффузии, формируют кластеры как в приповерхностной области, так и в объеме [22–25]. Центрами зарождения кластеров никеля служат атомы кислорода и другие дефекты решетки кремния, в большом количестве находящиеся вблизи поверхности, а также образующиеся в диффузионном слое n^+ -типа СЭ. Эти кластеры действуют как геттерирующие центры для различных неконтролируемых примесей (O, Cu, Fe, Cr, Au [10, 15, 20]) и других дефектов различной природы [25]. Основной вклад в энергию взаимодействия атомов примеси кластерами включений второй фазы в полупроводниках дают упругое и электрическое взаимодействие. Преобладающим является упругое взаимодействие, обусловленное различием атомных радиусов примеси и матрицы. Таким образом, основной движущей силой геттерирующего действия кластеров никеля (а также отдельных атомов никеля, находящихся в междоузельном положении) являются поля упругих напряжений, формирующиеся вокруг кластеров и обусловленные различием в атомных радиусах кремния и никеля (соответственно 1.11 и 1.24 Å) [27]. Атомам технологических примесей энергетически выгодно коагулировать на

оборванных связях вокруг кластеров, снижая таким образом энергию упругой деформации решетки. Следует отметить, что ранее подобный эффект геттерирования технологических примесей наблюдался при легировании монокристаллического кремния примесями редкоземельных элементов (РЗЭ), что приводило, в частности, к увеличению почти в 2 раза энергетического разрешения детекторов ионизирующих излучений, изготовленных на монокристаллическом кремнии, легированном РЗЭ, для α -частиц ^{239}Pu с энергией 5.4 МэВ вследствие увеличения в данном материале времени жизни ННЗ [28, 29].

Эффект геттерирования быстродиффундирующих технологических примесей (БДП) кластерами никеля обусловлен следующими факторами:

- на поверхности всегда имеется большое количество микродефектов, что приводит к интенсивной преципитации никеля. Преципитаты являются практически чистым металлом и имеют повышенную энергию связи с БДП (до ~ 2.7 эВ для монокристаллического никеля [30, 31]);

- в приповерхностной области концентрация атомов никеля больше, чем в объеме, на 2–3 порядка, поэтому эффективность геттерирования в приповерхностной области больше за счет большего количества образованных кластеров и преципитатов [10–13];

- скорость геттерирования в объеме СЭ меньше вследствие меньшей концентрации кластеров никеля и малого числа преципитатов. Учитывая высокий коэффициент диффузии БДП, они быстро достигают лицевой и тыльной поверхностей СЭ, где высокая концентрация преципитатов и кластеров никеля, а также больше энергия связи атомов БДП;

- процесс геттерирования кластерами никеля усиливается при дополнительном термическом отжиге. Дополнительный термический отжиг ускоряет достижение равновесия, однако очень высокая температура отжига ($T_{\text{отж}} > 900^\circ\text{C}$) приводит к распаду кластеров и преципитатов никеля [24–26].

В процессе формирования p – n -перехода СЭ, а также дополнительного термического отжига при $T_{\text{отж}} = 700\text{--}800^\circ\text{C}$ характер распределения никеля по объему практически не изменяется. Отсюда можно сделать вывод о преимущественном влиянии приповерхностного обогащенного никелем слоя на параметры СЭ.

Известно [9, 22], что электронейтральные атомы никеля, находящиеся в междоузельных метастабильных состояниях в решетке кремния, как в процессе диффузии, так и при дополнительном низкотемпературном термическом отжиге стремятся к более энергетически выгодному состоянию. Во время диффузии и охлаждения электронейтральные атомы никеля образуют зародыши кластеров и преципитатов, а дополнительный термический

отжиг активизирует процессы образования и роста размеров кластеров. В процессе формирования p – n -перехода СЭ, а также дополнительного термического отжига при $T_{\text{отж}} = 700\text{--}800^\circ\text{C}$ характер распределения никеля по объему практически не изменяется. Отсюда можно сделать вывод о преимущественном влиянии приповерхностного обогащенного никелем слоя на параметры СЭ.

Следует отметить, что эффективность уменьшения концентрации рекомбинационных центров при геттерировании непосредственно связана с пределом растворимости атомов никеля в технологических условиях диффузии, так как именно данная величина определяет концентрацию кластеров. С повышением температуры диффузии концентрация электронейтральных атомов никеля увеличивается, концентрация кластеров растет, как следствие, концентрация рекомбинационных центров уменьшается [15]. Однако, как правило, с увеличением температуры и длительности диффузии концентрация рекомбинационных центров также увеличивается [7]. Следовательно, время жизни ННЗ в СЭ уменьшается, а это приводит к снижению КПД. Кроме того, формирование p – n -перехода диффузией фосфора или бора проводится обычно при температурах $900\text{--}1050^\circ\text{C}$, что также всегда обуславливает увеличение концентрации рекомбинационных центров и существенное уменьшение τ [1–4]. Указанные факторы определяют необходимость оптимизации технологических условий геттерирования никелем.

С технологической точки зрения нанесение слоя металлического никеля на поверхность кремния для геттерирования можно осуществлять также и химическими путем (одновременно на десятки пластин), а диффузию атомов никеля можно проводить на открытом воздухе при относительно низкой температуре ($T_{\text{дифф}} = 800\text{--}850^\circ\text{C}$ в течение 30 мин). Исходя из этого метод предварительного легирования кремния никелем из химически осажденного слоя может быть перспективен для внедрения в промышленную технологию производства солнечных элементов. Данный метод может быть без существенных изменений совмещен со стандартными технологическими процессами изготовления СЭ на предприятиях современной электроники и позволит с небольшими дополнительными финансовыми и материальными затратами повысить эффективность солнечных элементов на основе монокристаллического кремния.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Установлено, что легирование солнечных элементов атомами никеля позволяет увеличить в них время жизни неосновных носителей заряда в материале до 2 раз, а эффективность преобразования солнечной энергии – на 20–25%. Полученные

экспериментальные результаты обусловлены взаимодействием электронейтральных атомов примеси никеля, находящихся в междоузельном положении или кластерах, с технологическими примесями. В процессе диффузии и последующего преципитирующего отжига никель формирует кластеры как в приповерхностной области, так и в объеме образцов. Показано, что распределение кластеров никеля в объеме материала является практически однородным, а их размер не превышает 0.5 мкм. Концентрация кластеров в объеме составляет $\sim 10^{11} - 10^{13} \text{ см}^{-3}$, а в приповерхностном слое — $\sim 10^{13} - 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Установлено, что в повышении эффективности солнечных элементов определяющую роль играют процессы геттерирования кластерами никеля рекомбинационно-активных быстродиффундирующих технологических примесей, происходящие в обогащенной никелем лицевой приповерхностной области солнечных элементов.

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы выражают благодарность профессору Х.М. Илиеву за ценные советы и участие в обсуждении результатов.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Green M., Dunlop E., Hohl-Ebinger J., Yoshita M., Kopidakis N., Hao X. Solar cell efficiency tables (version 58) // *Prog Photovolt Res Appl.* 2021. V. 29. P. 657–667. <https://doi.org/10.1002/ppp.3444>
2. Ikhmayies Sh. *Advances in Silicon Solar Cells* // Springer International Publishing. 2018. P. 337. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-69703-1>
3. Panaiotti I.E., Terukov E.I. A Study of the Effect of Radiation on Recombination Loss in Heterojunction Solar Cells Based on Single-Crystal Silicon // *Tech. Phys. Lett.* 2019. V. 45. No. 3. P. 193–196. <https://doi.org/10.1134/S106378501903012X>
4. Richter A., Müller R., Benick J., Feldmann F., Steinhäuser B., Reichel Ch., Fell A., Bivour M., Hermle M., Glunz S.W. Design rules for high-efficiency both-sides-contacted silicon solar cells with balanced charge carrier transport and recombination losses // *Nature Energy.* 2021. V. 6. P. 429–438. <https://doi.org/10.1038/s41560-021-00805-w>
5. Koval'chuk N.S., Lastovskii S.B., Odzhaev V.B., Petlitskii A.N., Prosolovich V.S., Shestovsky D.V., Yavid V.Yu., Yankovskii Yu.N. Influence of Structural Defects on the Electrophysical Parameters of pin-Photodiodes // *Russian Microelectronics.* 2023. V. 52. No. 4. P. 276–282. DOI: 10.31857/S054412692370045X.
6. Yatsukhnenko S., Druzhinin A., Ostrovskii I., Khoverko Yu., Chernetskiy M. Nanoscale Conductive Channels in Silicon Whiskers with Nickel Impurity // *Nanoscale Res Lett.* 2017. V. 12. No. 78. P. 1–7. <https://doi.org/10.1186/s11671-017-1855-9>
7. Liu A., Phang S.P., Macdonald D. Gettering in silicon photovoltaics: A review // *Solar Energy Materials and Solar Cells.* 2022. V. 234. P. 111447. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2021.111447>
8. Chistyakova A.A., Bazhanov D.I. The Study of Nickel Impurity Segregation on LSNT Perovskite Open Surfaces by Ab Initio Molecular Dynamics // *Russ Microelectron.* 2022. V. 51. P. 654–658. <https://doi.org/10.1134/S1063739722080121>
9. Bayrambay I., Kanatbay I., Khayratdin K., Gulbadan S. Suppression of harmful impurity atoms with clusters of nickel impurity atoms in a silicon lattice // *AIP Conference Proceedings.* 2022. V. 2552. P. 060015. <https://doi.org/10.1063/5.0129486>
10. Spit F.H.M., Gupta D., Tu K.N. Diffusivity and solubility of Ni (63Ni) in monocrystalline Si // *Phys. Review B.* 1989. V. 39. P. 1255–1260.
11. Lindroos J., Fenning D.P., Backlund D.J., Verlage E., Gorgulla A., Estreicher S.K., Savin H., Buonassisi T. Nickel: A very fast diffuser in silicon // *J. Appl. Phys.* 2013. V. 113. P. 204906. <https://doi.org/10.1063/1.4807799>
12. Bakhadyrkhanov M.K., Isamov S.B., Kenzhaev Z.T., Koveshnikov S.V. Studying the Effect of Doping with Nickel on Silicon-Based Solar Cells with a Deep $p-n$ -Junction // *Tech. Phys. Lett.* 2019. V. 45. No. 10. P. 959–962. <https://doi.org/10.1134/S1063785019100031>
13. Bakhadyrkhanov M.K., Isamov S.B., Kenzhaev Z.T., Melebaev D., Zikrillayev Kh.F., Ikhtiyarova G.A. Silicon Photovoltaic Cells with Deep $p-n$ -Junction // *Appl. Sol. Energy.* 2020. V. 56. No. 1. P. 13–17. <https://doi.org/10.3103/S0003701X2001003X>
14. Bakhadyrkhanov M.K., Kenzhaev Z.T. Optimal Conditions for Nickel Doping to Improve the Efficiency of Silicon Photoelectric Cells // *Tech. Phys.* 2021. V. 66. No. 7. P. 851–856. <https://doi.org/10.1134/S1063784221060049>
15. Bakhadyrkhanov M.K., Kenzhaev Z.T., Turekeev Kh.S., Isakov B.O., Usmonov A.A. Gettering properties of nickel in silicon photocells // *Tech. Phys.* 2022. V. 67. No. 14. P. 2217–2220. DOI: 10.21883/TP.2022.14.55221.99–21.
16. Zikrillayev N., Kenzhaev Z., Ismailov T., Kurbanova U., Aliyev B. Effect of nickel doping on the spectral sensitivity of silicon solar cells // *E3S Web of Conferences.* 2023. V. 434. P. 01036 (1–3). <https://doi.org/10.1051/e3sconf/202343401036>
17. Kenzhaev Z.T., Zikrillayev N.F., Ayupov K.S., Ismailov K.A., Koveshnikov S.V. & Ismailov T.B. Enhancing the Efficiency of Silicon Solar Cells through Nickel Doping // *Surf. Engin. Appl. Electrochem.* 2023. V. 59. No. 6. P. 858–866. <https://doi.org/10.3103/S1068375523060108>
18. Kerimov E.A. Study of Photodetectors with Schottky Barriers Based on the IrSi – Si Contact // *Russ Microelectron.* 2023. V. 52. P. 32–34. <https://doi.org/10.1134/S1063739722030040>
19. Dubovikov K.M., Garin A.S., Marchenko E.S., Baigonakova G.A., Shishelova A.A., Kovaleva M.A. Effect of Annealing Temperature on the Surface Structure and Properties of

- Porous TiNi // *Inorg. Mater.* 2021. No. 57. P. 1242–1249. <https://doi.org/10.1134/S0020168521120050>
20. Koveshnikov S., Kononchuk O. Gettering of Cu and Ni in mega-electron-volt ion-implanted epitaxial silicon // *Appl. Phys. Lett.* 1998. V. 73. No. 16. P. 2340. <https://doi.org/10.1063/1.122455>
 21. Togatov V.V., Gnatyuk P.A. A method for measuring the lifetime of charge carriers in the base regions of high-speed diode structures // *Semiconductors.* 2005. V. 39. P. 360–363. <https://doi.org/10.1134/1.1882802>
 22. Mil'vidskii M.G., Chaldyshev V.V. Nanometer-size atomic clusters in semiconductors – a new approach to tailoring material properties // *Semiconductors.* 1998. V. 32. No. 5. P. 457–465. <https://doi.org/10.1063/1.4807799>
 23. Gafner Y.Y., Gafner S.L., Entel P. Formation of an icosahedral structure during crystallization of nickel nanoclusters // *Phys. Solid State.* 2004. V. 46. No. 7. P. 1327–1330. <https://doi.org/10.1134/1.1778460>
 24. Tanaka Sh., Ikari T., Kitagawa H. In-Diffusion and Annealing Processes of Substitutional Nickel Atoms in Dislocation-Free Silicon // *Jpn. J. Appl. Phys.* 2001. V. 40. No. 5R. P. 3063–3068. DOI: 10.1143/JJAP.40.3063.
 25. Ismaylov B.K., Zikrillayev N.F., Ismailov K.A., Kenzhaev Z.T. Clusters of impurity nickel atoms and their migration in the crystal lattice of silicon // *Physical Sciences and Technology.* 2023. V. 10. No. 1. P. 13–18. <https://doi.org/10.26577/phst.2023.v10.i1.02>
 26. Серафина Б. Преобразование солнечной энергии. М.: Энергоиздат, 1982. 320 с.
 27. Эмсли Дж. Элементы. Справочник: пер. с англ. М.: Мир, 1993. 256 с.
 28. Афанасьева Н.П., Бринкевич Д.И., Просолович В.С., Янковский Ю.Н. Легирование кремния лантаноидами как способ оптимизации параметров детекторов ионизирующих излучений // *Приборы и техника эксперимента.* 2002. № 2. С. 24–26.
 29. Дутов А.Г., Комар В.А., Петров В.В., Просолович В.С., Чесноков С.А., Янковский Ю.Н. Геттерирование технологических примесей редкоземельными элементами в кремнии // *Материалы 7-й междунар. конф. по микроэлектронике.* Минск, 1990. Т. 1. С. 34–36.
 30. Егоров С.Н. Расчет поверхностной энергии металлов в твердом состоянии // *Известия вузов. Северо-кавказский регион.* 2003. № 3. С. 132–136.
 31. Dellis S., Christoulaki A., Spiliopoulos N., Anastassopoulos D.L., Vradis A.A. Electrochemical synthesis of large diameter monocrystalline nickel nanowires in porous alumina membranes // *J. Appl. Phys.* 2013. V. 114. P. 164308. <https://doi.org/10.1063/1.4826900>

INFLUENCE OF NICKEL IMPURITIES ON THE OPERATIONAL PARAMETERS OF A SILICON SOLAR CELL

© 2024 Z. T. Kenzhaev^{1, *}, N. F. Zikrillayev¹, V. B. Odzhaev², K. A. Ismailov³, V. S. Prosolovich², Kh. F. Zikrillayev¹, S. V. Koveshnikov¹

¹Tashkent State Technical University, Tashkent, Uzbekistan

²Belarussian State University, Minsk, Belarus

³Karakalpak State University, Nukus, Uzbekistan

*E-mail: zoir1991@bk.ru

The results of studies of the influence of nickel impurities introduced by diffusion into monocrystalline silicon on the characteristics of solar cells are presented. It has been established that doping with nickel atoms makes it possible to increase the lifetime of minority charge carriers in the material by up to 2 times, and the efficiency of solar cells by 20–25%. It was shown that the distribution of nickel clusters in the volume of the material is almost uniform, and their size does not exceed 0.5 μm . The concentration of clusters in the volume is $\sim 10^{11}$ – 10^{13} cm^{-3} , and in the near-surface layer — $\sim 10^{13}$ – 10^{15} cm^{-3} . The physical mechanisms of the influence of bulk and near-surface clusters of nickel atoms on the efficiency of silicon solar cells have been identified. It has been established experimentally that the processes of gettering of recombination-active technological impurities by nickel clusters, which occur in the nickel-enriched front surface region of solar cells, play a decisive role in increasing their efficiency.

Keywords: silicon solar cell, diffusion, nickel clusters, recombination centers, gettering

REFERENCES

1. Green M. et al. Solar cell efficiency tables (version 58) // *Prog Photovolt Res Appl.* 2021. V. 29. P. 657–667. <https://doi.org/10.1002/pip.3444>
2. Ikhtmayies Sh. *Advances in Silicon Solar Cells* // Springer International Publishing. 2018. P. 337. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-69703-1>
3. Panaiotti I.E., Terukov E.I. A Study of the Effect of Radiation on Recombination Loss in Heterojunction Solar Cells Based on Single-Crystal Silicon // *Tech. Phys. Lett.* 2019. V. 45. No. 3. P. 193–196. <https://doi.org/10.1134/S106378501903012X>
4. Richter A. et al. Design rules for high-efficiency both-sides-contacted silicon solar cells with balanced charge

- carrier transport and recombination losses // *Nature Energy*. 2021. V. 6. P. 429–438.
<https://doi.org/10.1038/s41560-021-00805-w>
5. Koval'chuk N.S. *et al.* Yankovskii Influence of Structural Defects on the Electrophysical Parameters of pin-Photodiodes // *Russian Microelectronics*. 2023. V. 52. No. 4. P. 276–282.
 DOI: 10.31857/S054412692370045X.
 6. Yatsukhnenko S. *et al.* Nanoscale Conductive Channels in Silicon Whiskers with Nickel Impurity // *Nanoscale Res Lett*. 2017. V. 12. No. 78. P. 1–7.
<https://doi.org/10.1186/s11671-017-1855-9>
 7. Liu A., Phang S.P., Macdonald D. Gettering in silicon photovoltaics: A review // *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 2022. V. 234. P. 111447.
<https://doi.org/10.1016/j.solmat.2021.111447>
 8. Chistyakova A.A., Bazhanov D.I. The Study of Nickel Impurity Segregation on LSNT Perovskite Open Surfaces by Ab Initio Molecular Dynamics // *Russ Microelectron*. 2022. V. 51. P. 654–658.
<https://doi.org/10.1134/S1063739722080121>
 9. Bayrambay I. *et al.* Suppression of harmful impurity atoms with clusters of nickel impurity atoms in a silicon lattice // *AIP Conference Proceedings*. 2022. V. 2552. P. 060015.
<https://doi.org/10.1063/5.0129486>
 10. Spit F.H.M., Gupta D., Tu K.N. Diffusivity and solubility of Ni (63Ni) in monocrystalline Si // *Phys. Review B*. 1989. V. 39. P. 1255–1260.
 11. Lindroos J. *et al.* Nickel: A very fast diffuser in silicon // *J. Appl. Phys.* 2013. V. 113. P. 204906.
<https://doi.org/10.1063/1.4807799>
 12. Bakhadyrkhanov M.K. *et al.* Studying the Effect of Doping with Nickel on Silicon-Based Solar Cells with a Deep p – n -Junction // *Tech. Phys. Lett.* 2019. V. 45. No. 10. P. 959–962.
<https://doi.org/10.1134/S1063785019100031>
 13. Bakhadyrkhanov M.K. *et al.* Silicon Photovoltaic Cells with Deep p – n -Junction // *Appl. Sol. Energy*. 2020. V. 56. No. 1. P. 13–17.
<https://doi.org/10.3103/S0003701X2001003X>
 14. Bakhadyrkhanov M.K., Kenzhaev Z.T. Optimal Conditions for Nickel Doping to Improve the Efficiency of Silicon Photoelectric Cells // *Tech. Phys.* 2021. V. 66. No. 7. P. 851–856.
<https://doi.org/10.1134/S1063784221060049>
 15. Bakhadyrkhanov M.K. *et al.* Gettering properties of nickel in silicon photocells // *Tech. Phys.* 2022. V. 67. No. 14. P. 2217–2220.
 DOI: 10.21883/TP.2022.14.55221.99-21.
 16. Zikrillayev N. *et al.* Effect of nickel doping on the spectral sensitivity of silicon solar cells // *E3S Web of Conferences*. 2023. V. 434. P. 01036 (1–3).
<https://doi.org/10.1051/e3sconf/202343401036>
 17. Kenzhaev Z.T. *et al.* Enhancing the Efficiency of Silicon Solar Cells through Nickel Doping // *Surf. Engin. Appl. Electrochem*. 2023. V. 59. No. 6. P. 858–866.
<https://doi.org/10.3103/S1068375523060108>
 18. Kerimov E.A. Study of Photodetectors with Schottky Barriers Based on the IrSi–Si Contact // *Russ Microelectron*. 2023. V. 52. P. 32–34.
<https://doi.org/10.1134/S1063739722030040>
 19. Dubovikov K.M., Kovaleva M.A. Effect of Annealing Temperature on the Surface Structure and Properties of Porous TiNi // *Inorg. Mater.* 2021. No. 57. P. 1242–1249.
<https://doi.org/10.1134/S0020168521120050>
 20. Koveshnikov S., Kononchuk O. Gettering of Cu and Ni in mega-electron-volt ion-implanted epitaxial silicon // *Appl. Phys. Lett.* 1998. V. 73. No. 16. P. 2340.
<https://doi.org/10.1063/1.122455>
 21. Togatov V.V., Gnatyuk P.A. A method for measuring the lifetime of charge carriers in the base regions of high-speed diode structures // *Semiconductors*. 2005. V. 39. P. 360–363.
<https://doi.org/10.1134/1.1882802>
 22. Mil'vidskii M.G., Chaldyshev V.V. Nanometer-size atomic clusters in semiconductors — a new approach to tailoring material properties // *Semiconductors*. 1998. V. 32. No. 5. P. 457–465.
<https://doi.org/10.1063/1.4807799>
 23. Gafner Y.Y., Gafner S.L., Entel P. Formation of an icosahedral structure during crystallization of nickel nanoclusters // *Phys. Solid State*. 2004. V. 46. No. 7. P. 1327–1330.
<https://doi.org/10.1134/1.1778460>
 24. Tanaka Sh., Ikari T., Kitagawa H. In-Diffusion and Annealing Processes of Substitutional Nickel Atoms in Dislocation-Free Silicon // *Jpn. J. Appl. Phys.* 2001. V. 40. No. 5R. P. 3063–3068.
 DOI: 10.1143/JJAP.40.3063.
 25. Ismaylov B.K. *et al.* Clusters of impurity nickel atoms and their migration in the crystal lattice of silicon // *Physical Sciences and Technology*. 2023. V. 10. No. 1. P. 13–18.
<https://doi.org/10.26577/phst.2023.v10.i1.02>
 26. Serafina B. Conversion of solar energy. Moscow: Energoizdat, 1982. 320 p. [in Russian].
 27. Emslie J. Elements: Directory. Translation from English. Moscow, 1993. 256 p. [in Russian].
 28. Afanasyeva N.P., Brinkevich D.I., Prosolovich V.S., Yankovsky Y.N. Lanthanoid doping of silicon as a way to optimize the parameters of ionizing radiation detectors // *Instrumentation and Experimental Technique*. 2002. No. 2. P. 24–26 (in Russian).
 29. Dutov A.G., Komar V.A., Petrov V.V., Prosolovich V.S., Chesnokov S.A., Yankovsky Y.N. Getterization of technological impurities by rare-earth elements in silicon // *Proceedings of the 7th Intern. Conf. on Microelectronics*. Minsk, 1990. No. 1. P. 34–36 [in Russian].
 30. Egorov S.N. Calculation of the surface energy of metals in the solid state // *Izvestiya Vuzov. North-Caucasian region*. 2003. No. 3. P. 132–136 [in Russian].
 31. Dellis S. *et al.* Electrochemical synthesis of large diameter monocrystalline nickel nanowires in porous alumina membranes // *J. Appl. Phys.* 2013. V. 114. P. 164308.
<https://doi.org/10.1063/1.4826900>

ВРЕМЕННЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ МЕХАНИЗМОВ ТОКОПРОХОЖДЕНИЯ В ЛЕГИРОВАННОМ ЭРБИЕМ ПОРИСТОМ КРЕМНИИ

© 2024 г. Э.Х. Хамзин¹, *, Д.А. Услин¹

¹Самарский национальный исследовательский университет им. академика С. П. Королева,
Самара, Россия

*E-mail: elkhan.k.khamzin@gmail.com

Поступила в редакцию 22.12.2023 г.

После доработки 01.02.2024 г.

Принята к публикации 05.02.2024 г.

В работе рассматриваются основные механизмы проводимости в кремниевых МДП-структурах. Объектом исследования выступает пористый кремний, легированный эрбиевой примесью водного раствора азотнокислого эрбия $\text{Er}(\text{NO}_3)_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ методом температурного отжига в диффузионной печи при температуре 800°C в течение 1 ч. Представлены сравнительные характеристики вольт-амперных и вольт-фарадных зависимостей, описывающих закономерные изменения механизмов токопрохождения и захвата заряда в исследуемых образцах. Результаты работы качественно и количественно описывают временное изменение электрических характеристик пористого кремния, которые могут быть приняты во внимание технологами при понимании механизмов токопереноса в люминесцентных структурах пористого кремния с ионами эрбия, а также исследовании и изготовлении светоизлучательных диодов на его основе.

Ключевые слова: пористый кремний, механизмы токопрохождения, эффект Пулла—Френкеля, эрбий, вольт-амперная и вольт-фарадная характеристики

DOI: 10.31857/S0544126924020072

1. ВВЕДЕНИЕ

Объяснение механизмов проводимости полупроводниковых структур является одной из важнейших задач в физике конденсированного состояния. Понимание основных принципов работы данных механизмов необходимо для развития и исследования материалов, потенциально пригодных для создания новых и усовершенствования уже существующих микроэлектронных устройств. Пористый кремний как один из материалов — кандидатов для решения задач развития эффективной микроэлектронной базы представляет интерес ввиду универсальности его структуры [1–3]. Допируя пористый слой примесью различных химических элементов, можно получить совершенно уникальный электрический материал со специфичным механизмом проводимости и условиями контроля протекающего по нему тока. Изменения в электрических характеристиках таких материалов могут оказывать влияние и на их оптические свойства, например, на люминесцентные [4], ИК и ап-конверсионные оптические свойства [5]. Отсюда вытекает уже более узкое применение и развитие

данного материала в технологиях передачи, хранения и считывания информации, а также многие другие узконаправленные приложения [6].

В частности, использование примеси редкоземельного элемента (РЗЭ) — эрбия потенциально может увеличить ионную проводимость в кристалле [7], а благодаря технологическим особенностям приготовления образцов на основе ПК, легированного эрбием, может реализовываться улучшение люминесценции, которая может протекать в комнатных условиях [8–10].

Из проведенных исследований известно, что наиболее эффективной люминесценцией обладают образцы ПК, в составе которого присутствует кубический сесквиоксид эрбия [11]. Данный кристалл может быть отнесен к группе так называемых high-k диэлектриков, непосредственно влияющих на эффективность электрических свойств полупроводниковых материалов, а именно, на уменьшение диэлектрических потерь материала [12, 13].

Основной целью данной работы является описание временного изменения электрических свойств ПК с ионами эрбия.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Изготовление образцов пористого кремния с ионами эрбия состояло из следующих этапов: электрохимическое травление кремниевых пластин с образованием пористого слоя; насыщение пористого слоя эрбием из водного раствора соли азотнокислого эрбия; высокотемпературный отжиг на воздухе и нанесение омических контактов с помощью контактно-проводящих паст разного состава.

В данной работе использовались кремниевые пластины p -типа с текстурированной и шлифованной поверхностью с удельным сопротивлением 3 и 5 Ом/см² соответственно. Пористый слой кремния создавался методом анодного травления на вертикальной электролитической ячейке. В качестве травителя выступал раствор фтороводородной кислоты, изопропилового спирта и дистиллированной воды в соотношении 5 : 29 : 6 соответственно.

Образцы пористого кремния прокапывались водным раствором комплекса $\text{Er}(\text{NO}_3)_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, после чего подвергались температурному отжигу для диффузии ионов эрбия в пористый слой кремния в открытой печи в атмосфере воздуха. Температура отжига задавалась 800°С и поддерживалась в течение всего процесса с точностью до 1°С. Время отжига составляло 60 мин. Температура диффузионного отжига поддерживалась блоком автоматической регулировки температуры, который создал однородное термическое плато вдоль оси печи. Во избежание термоудара образцы помещались в рабочую зону печи постепенно и извлекались после остывания печи.

Омические контакты Шотки для серии образцов создавались при разной технологии нанесения металла. Для партии изготовленных образцов, исследуемых в этой работе, использовалось поверхностное нанесение контактно-проводящих паст (КПП) алюминиевого и композитного состава — серебро/свинец/олово.

Для экспериментального исследования электрофизических характеристик полученных образцов использовалась зондовая станция PS-4S совместно с источником-измерителем Keithley 2450 для снятия вольт-амперной характеристики (ВАХ) в вертикальном приложении разности потенциалов зондов с поверхности области пористого кремния. Для получения вольт-фарадной характеристики (ВФХ) использовался универсальный измерительный мост (УИМ) E7-12.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Основной механизм проводимости МДП-структуры может быть определен из зависимости показателя степени γ от значения квадратного корня напряжения $U^{1/2}$ методами, представленными в работах [14–17]. Значение γ может быть найдено из отношения

производной десятичного логарифма тока к производной такого же логарифма напряжения:

$$\gamma = \frac{\partial \log(I)}{\partial \log(U)},$$

где γ — параметр степенного показателя эмпирической зависимости тока от напряжения; I , U — значения силы тока и напряжения на кривой ВАХ исследуемых образцов.

3.1. Вольт-амперные характеристики

На рис. 1 показаны зависимости γ от $U^{1/2}$ для прямой ветви тока искомым МДП-структур и их вольт-амперные характеристики, представленные в логарифмической шкале для серий измерений 2015 и 2023 гг.

Из приведенных графиков зависимости механизма проводимости видно, что у большинства свежеприготовленных образцов проявляется эффект Пула—Френкеля. Исключением является образец № 2, который продемонстрировал квантово-размерный эффект проводимости кристалла. После большого временного периода ожидания в измеренной зависимости картина механизма проводимости для каждого образца изменилась и стала индивидуальной. Показатель γ изменяется динамически с учетом приложенного напряжения. Такое поведение говорит о меняющихся условиях протекания тока через образец пористого слоя. Изменение механизмов проводимости коррелирует с изменением вольт-фарадных характеристики образцов. Типичное для МДП-структур деградиационное поведение вольт-амперных характеристик может быть связано с ухудшением барьерных свойств контакта металл — полупроводник и увеличением диэлектрических потерь [18]. Однако с течением времени не все образцы показали ухудшение электрических характеристик. Образцы № 2 и № 6 с текстурированной поверхностью, легированные водным раствором азотнокислого эрбия с концентрацией 7%, и омическими контактами проводящей пасты на основе алюминия, лабораторные характеристики которых представлены в табл. 1, продемонстрировали увеличение проводимости на 36 и 104% соответственно.

Скачки в значениях γ на графиках показывают разный характер протекания тока на неоднородной морфологии наноструктур. Формирование пленки оксида приводит к реорганизации носителей заряда в проводящей среде.

Представленные в табл. 1 значения диэлектрических потерь находились аналитическим путем через ВАХ прямого тока по простой зависимости:

$$R = 1/\tan \delta = \Delta I / \Delta U,$$

где при измерении сопротивления R на участке кривой учитывалась абсолютная погрешность косвенных измерений:

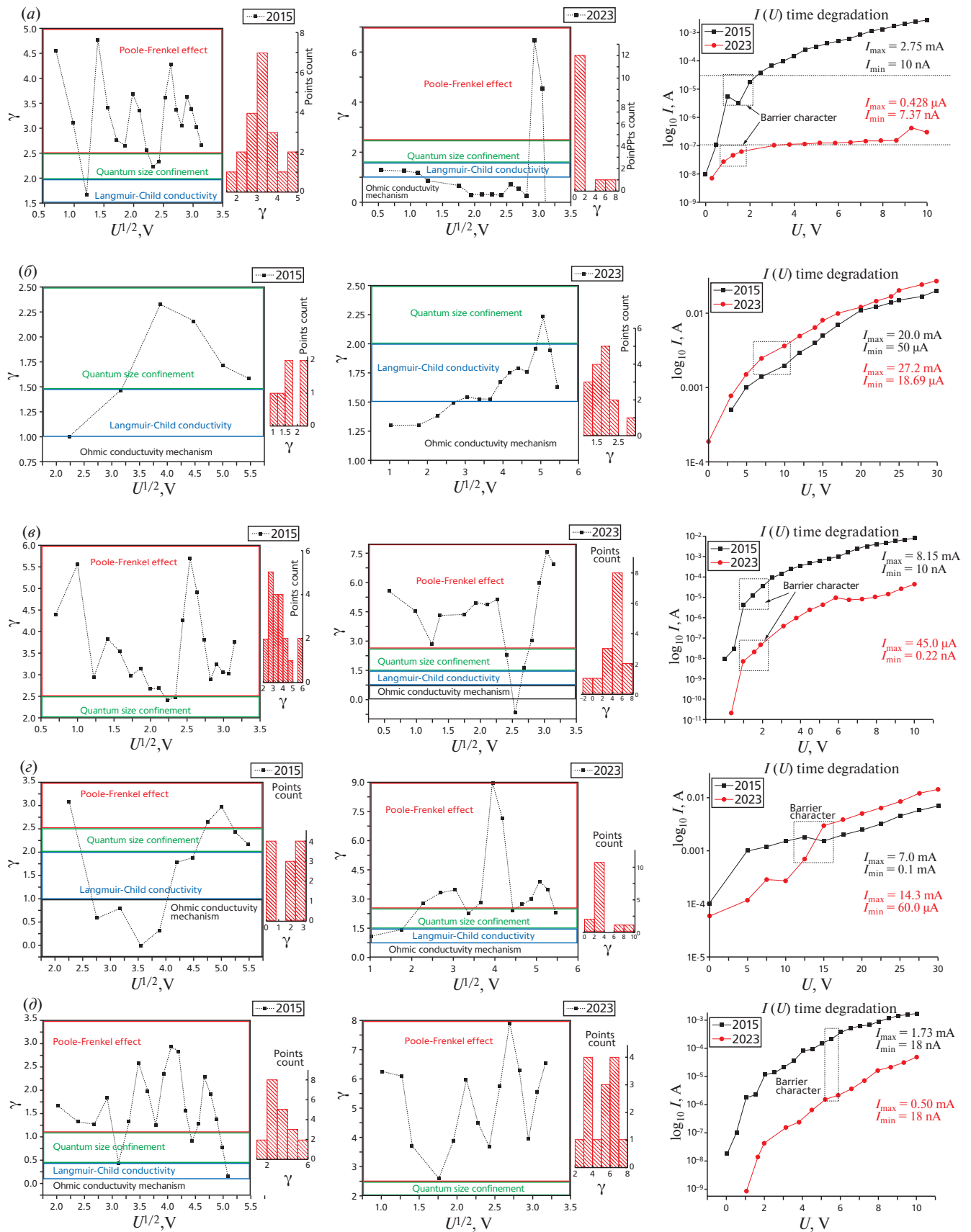


Рис. 1. Зависимость механизмов проводимости показателя γ от $U^{1/2}$ и ВАХ для образцов: а — № 1; б — № 2; в — № 3; д — № 10.

$$\Delta R = (\partial R / \partial J) \Delta J + (\partial R / \partial U) \Delta U.$$

Ошибка косвенных измерений для всех образцов в пределах доверительного значения составляла от 0.3 до 0.45%.

Динамическая крутизна, которая принимает размерность проводимости, рассчитывалась по формуле

$$g_m = \Delta I / \Delta U.$$

Примечательно то, что временное изменение электрических характеристик для образца № 2 связано с изменением механизма проводимости, которое “перешло” с модели квантового размерного ограничения на модель проводимости Ленгмюра—Чайлда. Характер изменения для образца № 6 проявляется в резком увеличении показателя γ . Причем увеличивается как пиковое значение, так и число точек, попадающих в область, описываемую эффектом Пула—Френкеля. Если в свежеприготовленном образце характер проводимости меняется и носит смешанный тип (эффект Пулла—Френкеля вместе с квантоворазмерным ограничением), то в состаренном образце стабильно прослеживается эффект Пулла—Френкеля.

В экспериментальной выборке образцы № 3 и № 10 показали почти одинаковое изменение таких электрических характеристик, как тангенс диэлектрических потерь и крутизна вольт-амперной зависимости, которая принимает значение проводимости измеряемых образцов. Данные значения могут быть объяснены ухудшением барьерной зависимости омических контактов созданных КПП, состав которой отличается от той, где образцы показали улучшенную вольт-амперометрическую зависимость. Это может быть подтверждено тем,

что характер токопрохождения внутри пористого слоя улучшился, так как показатель γ , как и в случае с образцом № 6, изменился схожим образом. Вполне вероятно, что эти же образцы могли бы сохранить или улучшить свои электрические характеристики на некоторую величину, если бы вместо многокомпонентной КПП (серебро/свинец/олово) использовался более простой по составу аналог алюминиевой пасты. Еще одной причиной снижения общей проводимости образцов могла послужить относительно низкая ионная проводимость эрбия, где концентрация легируемой примеси эрбия составляла 3%.

Изменения, прослеживаемые в механизме проводимости в образце № 1, также подтверждают деградацию проводящего контакта, где эффект Пула—Френкеля сменился простым омическим механизмом проводимости с большими диэлектрическими потерями.

3.2. Вольт-фарадные характеристики

Временные изменения в механизмах проводимости и вольт-амперных характеристиках исследуемых образцов также проявили себя в изменении емкостных свойств, показанных на рис. 2.

Как видно на графиках вольт-фарадной зависимости, участки резкого изменения емкости лежат в области положительного смещения, что свидетельствует о наличии отрицательного захваченного заряда на границе диэлектрик — полупроводник. Вольт-фарадные характеристики показывают, что характер насыщения и количество захваченного заряда изменились.

На образце № 1, по данным 2015 г., в зоне отрицательного смещения напряжения наблюдаются

Таблица 1. Электрические характеристики образцов

Номер образца, тип	J , cm ² A Etching	$I_{\max}$, mA	$\Delta U_{\text{leakage}}$, V	$\Delta I_{\text{leakage}}$, mA	R , k Ω	ΔR , k Ω	$\tan \delta \times 10^{-3}$	g_m , S
2015 1	1.6	2.75	2.04	1.30	0.638	1.905×10^{-3}	1.567	0.275×10^{-3}
2023 1	1.6	0.43×10^{-3}	1.10	4.28×10^{-4}	0.389×10^{-3}	116.7×10^{-4}	2570	42.8×10^{-6}
2015 2	1.6	20.00	10.0	10	1	0	1	0.666×10^{-3}
2023 2	1.6	27.20	11.30	16.95	1.501	3×10^{-3}	0.666	0.907×10^{-3}
2015 3	4.8	8.15	2.54	6.72	2.65	9.28×10^{-3}	0.377	0.815×10^{-3}
2023 3	4.8	4.50×10^{-2}	2.03	4.5×10^{-2}	2.216×10^{-2}	13.5×10^{-5}	45.12	4.5×10^{-6}
2015 6	4.8	7.0	13.77	7.0	0.508	0.22×10^{-3}	1.97	0.233×10^{-3}
2023 6	4.8	14.28	11.33	14.28	1.26	0.38×10^{-3}	0.793	0.476×10^{-3}
2015 10	4.8	1.73	4.02	1.63	0.405	0.14×10^{-3}	2.47	0.173×10^{-3}
2023 10	4.8	49.70×10^{-3}	2.25	49.7×10^{-3}	22.09×10^{-3}	6.6×10^{-5}	45.2	4.97×10^{-6}

две небольшие области насыщения положительного заряда, которые чередуются протечками по току. Резкое увеличение емкости представлено в области положительного смещения с накоплением отрицательного заряда. Изменения в 2023 г. также свидетельствуют о захваченном положительном и отрицательном заряде, однако представлена только одна область насыщения в зоне положительного смещения. Величина максимальной емкости при одном и том же приложенном напряжении уменьшилась с 33 до 14.6 пФ.

Образец № 2 сильно отличается от остальных. По данным 2015 г., образец не имел зон насыщения, однако, при достижении максимального значения в 37.52 пФ при напряжении 3 В сильно протекал по току, почти линейно падал до 17.72 пФ. Изменения в 2023 г. хорошо коррелируют с изменениями в ВАХ, показывая ее улучшение в виду полного отсутствия протекания тока на одном и том же участке напряжения. Максимальное значение в сравниваемом диапазоне составило 54.6 пФ, что на 45.5% больше предыдущего. Это может быть объяснено формированием стабильной пленки оксида в каналах пор ПК и захватом заряда, который благотворно влияет на электротранспортную систему ионной проводимости эрбия, увеличивая общую проводимость. Немаловажную роль в изменении механизма проводимости и улучшении электрических свойств играет изменение толщины диэлектрического слоя, которая напрямую связана

с количеством заряда и геометрией пористого слоя. Уменьшение тангенса диэлектрических потерь привело к уменьшению токов утечки, но в меньшей степени повлияло на величину генерации заряда. Рост пленки оксида способствовал изменению электротранспортной геометрии образца и смене квантово-размерной модели проводимости на проводимость, ограниченную пространственным зарядом, подчиняющуюся уравнению Лэнгмюра—Чайлда. Обобщая вышесказанное, можно сделать вывод, что рост толщины пленки оксида увеличил потенциальный барьер просачивания носителей заряда и создал проводящие каналы.

Изменение вольт-фарадных характеристик образца № 3 незначительно.

Несмотря на улучшения ВАХ характер изменения ВФХ образца № 6 отличается от № 2. Максимальное значение емкости при одном и том же входном напряжении составляет 61 пФ для данных 2015 г. и 6.6 пФ для данных 2023 г. соответственно. Можно предположить, что следствием увеличения проводимости почти в 2 раза в рамках предложенной модели Пула—Френкеля могло послужить уменьшение энергии на ловушке заряда. Увеличение числа ловушек и увеличение толщины пленки оксида могло благотворно повлиять на перераспределение заряда и, как следствие, увеличить выходной ток.

Образец № 10 показал изменения как в сторону отрицательного, так и положительного смещения

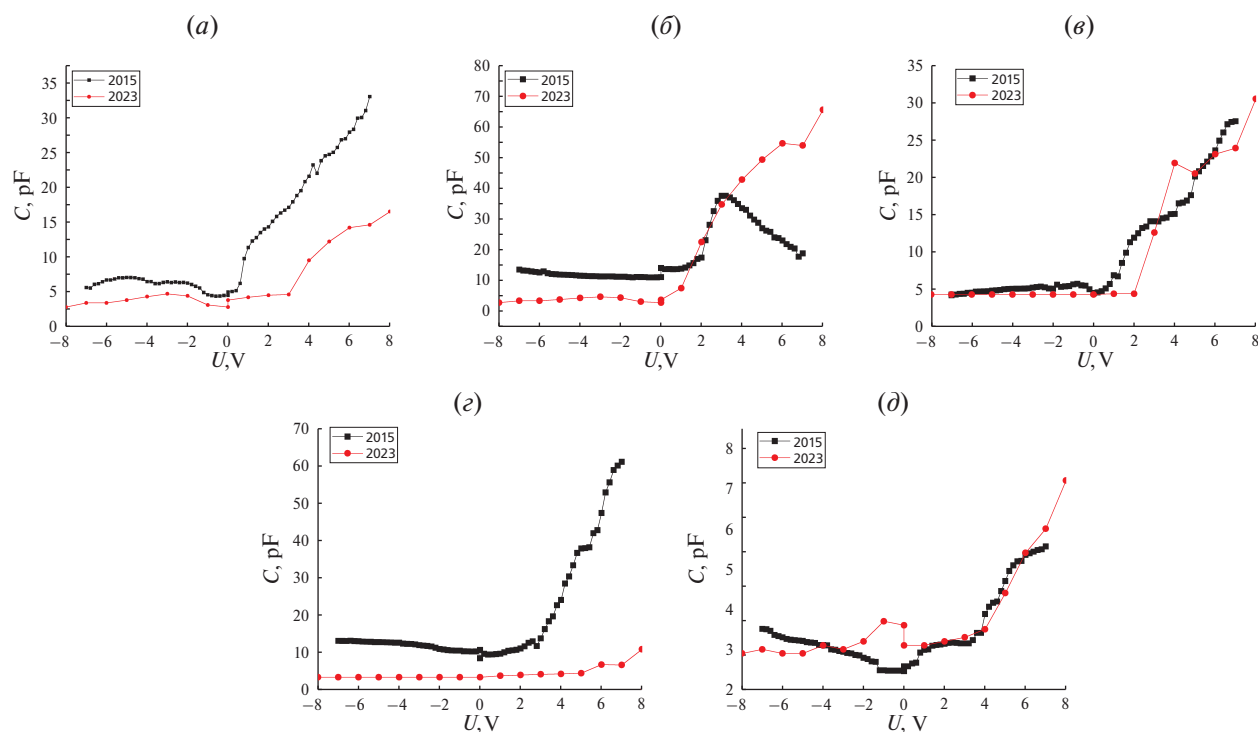


Рис. 2. ВФХ образцов: а — № 1; б — № 2; в — № 3; г — № 6; д — № 10.

напряжения. Емкость положительного заряда уменьшилась с 3.5 до 3 пФ, а отрицательного накопленного заряда — увеличилась с 5.56 до 6 пФ при равных значениях напряжения. После временных изменений зон насыщения становится больше (к единственной в области положительного смещения добавляется зона насыщения в отрицательном смещении напряжения).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Благодаря анализу механизмов проводимости на основе ВАХ в совокупности с ВФХ образцов удалось определить различные факторы, которые повлияли на изменение электрических характеристик образцов. Анализ электрических свойств позволил: определить основной механизм проводимости в ПК, легированных эрбием, выявить заметное влияние концентрации легирующей примеси, состава омического контакта и его барьерные свойства. Эрбиевая примесь и ее последующая диффузия вглубь образца выступает в роли high-k диэлектрика, благотворно влияет на электрические свойства пористого кремния. Временные изменения, вызванные увеличением диэлектрического слоя, сильно меняют картину проводимости материала, связывая величину накопленного заряда, диэлектрические потери и геометрические характеристики, которые во многом могут определить количество ловушек для носителей заряда в механизме проводимости Пула—Френкеля. Увеличение диэлектрического слоя также может стать основной причиной смены механизма квантоворазмерной проводимости, увеличивая потенциальный барьер и энергию, необходимую на его преодоление, на модель проводимости, ограниченной пространственным зарядом.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Lenshin A.C.* Formation and functional properties of nanostructures based on porous silicon // Dissertation for the degree of Doctor of Physical and Mathematical Sciences 01.04.10 — Physics of semiconductors. Voronezh, 2020.
2. *Canham L.* Routes of Formation for Porous Silicon. Handbook of Porous Silicon. 2014. P. 3–4.
3. *Latukhina N.V., Nechaev N.A., Khramkov V.A., Volkov A.V., Agafonov A.N.* Structures with macroporous silicon for photo-converters on silicon substrate // Thin Films in Optics and Nanoelectronics. Proc. of 18 International Symposium. Kharkov. 2006. V. 2. C. 207–211.
4. *Kimura T., Yokoi A., Horiguchi H., Saito R.* Electrochemical Er doping of porous silicon and its room temperature luminescence at ~1.54 μm // Appl. Phys. Lett. 1994. No. 65. P. 983–985.
5. *Penczek J., Chao I-Wen, Smith R.L., Knoesen A., Davis J.E. and Lee H.W.H.* Visible to near-infrared emission from a porous silicon device // Proceedings of LEOS.94. Boston, MA, USA. 1994. V. 2. P. 13–14. DOI: 10.1109/LEOS.1994.586286.
6. *Vercauteren R., Scheen G., Raskin J.-P., Francis L.A.* Porous silicon membranes and their applications: Recent advances, Sensors and Actuators A: Physical. 2021. V. 318. P. 112486. ISSN0924-4247. <https://doi.org/10.1016/j.sna.2020.112486>
7. *Johnson C.M., Reece P.J., Conibeer G.J.* Theoretical and experimental evaluation of multilayer porous silicon structures for enhanced erbium up-conversion luminescence. Optics (physics.optics), 2012. DOI: 10.48550/arXiv.1208.6046.
8. *Karoui A., Kechiantz A.* Sensitization of Porous Silicon with Germanium Quantum Dots for Up-Conversion of Low Energy Photons via Intermediate Band for Third Generation Solar Cells // ECS Transactions, IOP science. 2011. V. 41. No. 4. DOI: 10.1149/1.3628609.
9. *Toledo R.P., Huanca D.R., Oliveira A.F., dos Santos Filho S.G., Salcedo W.J.* Electrical and optical characterizations of erbium doped MPS/PANI heterojunctions // Applied Surface Science. 2020. V. 529. DOI:10.1016/j.apsusc.2020.146994.
10. *Karzanova M.V.* Luminescence of porous silicon with rare-earth element admixtures Dissertation for the degree of Candidate of Physical and Mathematical Sciences in the field of 01.04.10 — physics of semiconductors Nizhny Novgorod, 2013.
11. *Bondarenko V.P. et al.* Luminescence of erbium-doped porous silicon // Tech. Phys. Lett. 23. 1997. P. 3–4.
12. *Kashkarov P.K. et al.* Effective luminescence of erbium ions in silicon systems nanocrystals // OTT. 2004. T. 46. B. 1. P. 105–109.
13. *Yong-Gang Frank Ren.* Erbium Doped Silicon as an Optoelectronic Semiconductor // Material Dissertation for the doctorate degree of Department of Materials Science and Engineering in the filed of “Electronic Materials”. Boston: Massachusetts, 1994.
14. *Chyuan-Haur Kao, Hsiang Chen, Yu Tsung Pan, Jing Sing Chiu, Tien-Chang Lu.* The characteristics of the high-K Er₂O₃ (erbium oxide) dielectrics deposited on polycrystalline silicon, Solid State Communications. 2012. V. 152. Iss. 6. P. 504–508. DOI: 10.1016/j.ssc. 2011.12.042.
15. *Wu Deqi, Yao Jincheng, Zhao Hongsheng, Chang Aimin and Li Feng.* Leakage current mechanisms of ultrathin high-k Er₂O₃ gate dielectric film // IOP science Journal of Semiconductors. V. 30. No. 10. DOI: 10.1088/1674-4926/30/10/103003.
16. *Acha C.* Graphical analysis of current-voltage characteristics in memristive interfaces // Journal of Applied Physics. 2017. V. 121. No. 13. P. 134502. DOI: 10.1063/1.4979723.

17. Шалимова М. Б., Сачук Н. В. Анализ электрофизических характеристик бистабильных МДП-структур с фторидами самария и церия // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2020. Т. 23. № 1. С. 58–66.
DOI: 10.18469/1810-3189.2020.23.1.58-66.
18. Fu-Chien Chiu. A Review on Conduction Mechanisms in Dielectric Films // Advances in Materials Science and Engineering. 2014. Article ID578168. 18 p.
<https://doi.org/10.1155/2014/578168>

TEMPORARY CHANGES IN CURRENT FLOW MECHANISMS IN ERBIUM-DOPED POROUS SILICON

© 2024 E. Kh. Khamzin^{1, *}, D. A. Uslin¹

¹Samara National Research University after Academician S. P. Korolev, Samara, Russia

*E-mail: elkhan.k.khamzin@gmail.com

The paper discusses the basic mechanisms of conductivity in silicon MIS structures. The object of the study is porous silicon doped with an erbium impurity of an aqueous solution of erbium nitrate $\text{Er}(\text{NO}_3)_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ by temperature annealing in a diffusion furnace at a temperature of 800°C for 1 hour. Comparative characteristics of the current-voltage and capacitance-voltage dependences are presented, describing the regular changes in the mechanisms of current flow and charge capture in the samples under study. The results of the work qualitatively and quantitatively describe the temporary change in the electrical characteristics of porous silicon, which can be taken into account by technologists for better understanding the mechanisms of current transfer in luminescent structures of porous silicon with erbium ions, as well as in the study and manufacture of light-emitting diodes based on it.

Keywords: porous silicon, electric current transfer mechanisms, Pull–Frenkel effect, erbium, current-voltage and capacitance-voltage characteristics

REFERENCES

1. Lenshin A.C. Formation and functional properties of nanostructures based on porous silicon // Dissertation for the degree of Doctor of Physical and Mathematical Sciences 01.04.10 — Physics of semiconductors. Voronezh, 2020.
2. Canham L. Routes of Formation for Porous Silicon. Handbook of Porous Silicon. 2014. P. 3–4.
3. Latukhina N.V., Nechaev N.A., Khramkov V.A., Volkov A.V., Agafonov A.N. Structures with macroporous silicon for photo-converters on silicon substrate // Thin Films in Optics and Nanoelectronics. Proc. of 18 International Symposium. Kharkov. 2006. V. 2. C. 207–211.
4. Kimura T., Yokoi A., Horiguchi H., Saito R. Electrochemical Er doping of porous silicon and its room temperature luminescence at ~1.54 gm // Appl. Phys. Lett. 1994. No. 65. P. 983–985.
5. Penczek J., Chao I-Wen, Smith R.L., Knoesen A., Davis J.E. and Lee H.W.H. Visible to near-infrared emission from a porous silicon device // Proceedings of LEOS.94. Boston, MA, USA. 1994. V. 2. P. 13–14.
DOI: 10.1109/LEOS.1994.586286.
6. Vercauteren R., Scheen G., Raskin J.-P., Francis L.A. Porous silicon membranes and their applications: Recent advances, Sensors and Actuators A: Physical. 2021. V. 318. P. 112486. ISSN0924-4247.
<https://doi.org/10.1016/j.sna.2020.112486>
7. Johnson C.M., Reece P.J., Conibeer G.J. Theoretical and experimental evaluation of multilayer porous silicon structures for enhanced erbium up-conversion luminescence. Optics (physics.optics), 2012.
DOI: 10.48550/arXiv.1208.6046.
8. Karoui A., Kechiantz A. Sensitization of Porous Silicon with Germanium Quantum Dots for Up-Conversion of Low Energy Photons via Intermediate Band for Third Generation Solar Cells // ECS Transactions, IOP science. 2011. V. 41. No. 4. DOI: 10.1149/1.3628609.
9. Toledo R.P., Huanca D.R., Oliveira A.F., dos Santos Filho S.G., Salcedo W.J. Electrical and optical characterizations of erbium doped MPS/PANI heterojunctions // Applied Surface Science. 2020. V. 529.
DOI:10.1016/j.apsusc.2020.146994.
10. Karzanova M.V. Luminescence of porous silicon with rare-earth element admixtures Dissertation for the degree of Candidate of Physical and Mathematical Sciences in the field of 01.04.10 — physics of semiconductors Nizhny Novgorod, 2013.
11. Bondarenko V.P. et al. Luminescence of erbium-doped porous silicon // Tech. Phys. Lett. 23. 1997. P. 3–4.
12. Kashkarov P.K. et al. Effective luminescence of erbium ions in silicon systems nanocrystals // OTT. 2004. V. 46. Iss. 1. P. 105–109.
13. Yong-Gang Frank Ren. Erbium Doped Silicon as an Optoelectronic Semiconductor // Material Dissertation for the doctorate degree of Department of Materials Science and

- Engineering in the field of “Electronic Materials”. Boston: Massachusetts, 1994.
14. *Chyuan-Haur Kao, Hsiang Chen, Yu Tsung Pan, Jing Sing Chiu, Tien-Chang Lu*. The characteristics of the high-K Er_2O_3 (erbium oxide) dielectrics deposited on polycrystalline silicon, *Solid State Communications*. 2012. V. 152. Iss. 6. P. 504–508.
DOI: 10.1016/j.ssc. 2011.12.042.
 15. *Wu Deqi, Yao Jincheng, Zhao Hongsheng, Chang Aimin1 and Li Feng*. Leakage current mechanisms of ultrathin high-k Er_2O_3 gate dielectric film // *IOP science Journal of Semiconductors*. V. 30. No. 10.
DOI: 10.1088/1674-4926/30/10/103003.
 16. *Acha C*. Graphical analysis of current-voltage characteristics in memristive interfaces // *Journal of Applied Physics*. 2017. V. 121. No. 13. P. 134502.
DOI: 10.1063/1.4979723.
 17. *Shalimova M.B. and Sachuk N.V*. Analysis of electrophysical characteristics of bistable MIS structures with samarium and cerium fluorides, *Phys. Wave Processes Radio Syst*. 2020. V. 23. No. 1. P. 58–66.
<https://doi.org/10.18469/1810-3189.2020.23.1.58-66>
 18. *Fu-Chien Chiu*. A Review on Conduction Mechanisms in Dielectric Films // *Advances in Materials Science and Engineering*. 2014. Article ID578168. 18 p.
<https://doi.org/10.1155/2014/578168>