

ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ

МАТЕРИАЛЫ

ЭЛЕКТРОННОЙ

ТЕХНИКИ

1'15

Индекс по каталогам «Пресса России» и «Урал Пресс» 47215



Учредитель:

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС» (НИТУ «МИСиС»)

Журнал основан в 1998 г.
Издается один раз в 3 месяца.

Издатель: Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», 119049, г. Москва, Ленинский просп., д. 4.

Почтовый адрес редакции: 119119, г. Москва, Ленинский просп., д. 4, МИСиС.
Тел.: (495) 638–45–31, внутренний 040–68,
e-mail: met.misis@inbox.ru.

Отпечатано в типографии
Издательского дома «МИСиС», г. Москва,
тел.: (499) 236–76–17.

Подписано в печать 30.04.2015.
Формат 60×90/8. Печать офсетная.
Заказ № 4602. Бумага офсетная.
Печ. л. 9,5. Тираж 150. Цена свободная.

Журнал зарегистрирован
Федеральной службой по надзору в сфере
связи, информационных технологий и массо-
вых коммуникаций (ПИ № ФС 77–59522
от 23.10.2014), предыдущее свидетельство
№ 016108 от 15.05.1997 (Минпечати РФ).

Редактор М. И. Воронова
Корректор К. С. Чарчян
Набор А. В. Шемерова
Верстка А. А. Космынина

Главный редактор

ПАРХОМЕНКО ЮРИЙ НИКОЛАЕВИЧ,

д-р физ.-мат. наук, проф. (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)

Заместители главного редактора

ОСИПОВ Юрий Васильевич, канд. физ.-мат. наук, доц.,
КОСТИШИН Владимир Григорьевич, д-р физ.-мат. наук, доц.
(НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)

Ответственный секретарь редакции

Космынина Арина Александровна

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Акчурина Р. Х., д-р техн. наук, проф. (МИТХТ, Москва, Россия)
Асеев А. Л., акад. РАН (ИФП СО РАН, Новосибирск, Россия)
Бублик В. Т., д-р физ.-мат. наук, проф. (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Вуль А. Я., д-р физ.-мат. наук, проф. (ФТИ им. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия)
Гуляев Ю. В., акад. РАН (ИРЭ РАН, Москва, Россия)
Дашевский М. Я., проф. (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Двуреченский А. В., проф., член-кор. РАН (ИФП СО РАН, Новосибирск, Россия)
Казанский А. Г., д-р физ.-мат. наук (МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия)
Калошкин С. Д., д-р физ.-мат. наук, проф. (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Кобелева С. П., канд. физ.-мат. наук, доц. (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Ковалев А. Н., д-р физ.-мат. наук, проф. (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Кожитов Л. В., д-р техн. наук, проф. (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Козлова Н. С., канд. физ.-мат. наук (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Литовченко В. Г., акад. Укр АН (ИФП им. В. Е. Лашкарева НАН Украины, Киев, Украина)
Манякин Ф. И., д-р физ.-мат. наук, проф. (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Мордкович В. Н., д-р физ.-мат. наук, проф. (ИПТМ РАН, Черноголовка, Россия)
Наими Е. К., д-р физ.-мат. наук, проф. (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Новоторцев В. М., акад. РАН (ИОНХ им. Н. С. Курнакова РАН, Москва, Россия)
Орликовский А. А., акад. РАН (ФТИАН, Москва, Россия)
Сафаралиев Г. К., проф., член-кор. РАН (ДГУ, Махачкала, Россия)
Соболев Н. А., проф. (Университет Авейро, Авейро, Португалия)
Тодуа П. А., д-р физ.-мат. наук, проф. (ОАО «НИЦПВ», Москва, Россия)
Федотов А. К., проф. (БГУ, Минск, Беларусь)
Чаплыгин Ю. А., проф., член-кор. РАН (МИЭТ, Москва, Россия)
Бланка Х., проф. (Университет Овьедо, Овьедо, Испания)
Маппс Д. Дж., проф. (Университет Плимута, Плимут, Великобритания)
Пенг Х. Х., проф. (Университет Бристоля, Бристоль, Великобритания)
Васкес Л., проф., докт. физики (Университет Комплутенс, Мадрид, Испания)

Журнал по решению ВАК Минобразования РФ включен в «Перечень периодических и научно-технических изданий, выпускаемых в Российской Федерации, в которых рекомендуется публикация основных результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора наук».

IZVESTIYA VYSSHIKH UCHEBNYKH ZAVEDENII

MATERIALY ELEKTRONNOI TEKHNIKI

1'15

**Founders:**

National University of Science
and Technology «MISiS»

**Izvestiya vuzov. Materialy
elektronnoi tekhniki =
Materials of Electronics
Engineering. 2015, vol. 18, no. 1**

*The Magazine was founded in 1998
and is published once in 3 months.*

Address of correspondence:

National University of Science
and Technology «MISiS»,
119049, Russia, Moscow, Leninskiy prospekt 4.
Tel./fax: +7(495)638–45–31,
e-mail: met.misis@inbox.ru.

The magazine

«Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii.
Materialy Elektronnoi Tekhniki =
Materials of Electronics Engineering»
is registered in Federal Service for Supervision
in the Sphere of Mass Communications
(PI number FS 77–59522 of 10.23.2014),
the previous certificate number 016108 from
15.05.1997.

Editor M. I. Voronova
Corrector K. S. Charchyan
Typesetting A. V. Shchemerova

Editor-in-Chief

Yuri Nikolaevich Parkhomenko, Prof., Dr. Sci. (Phys.–Math.),
Scientific Chief of the State Scientific–Research and Design Institute of Rare–Metal Industry
«Giredmet» JSC, Head of Department of the Material Science of Semiconductors
and Dielectrics at the MISiS

Deputy Editor-in-Chief

Yuri Vasil'evich Osipov, Cand. Sci. (Phys.–Math.), Assoc. Prof.,
Deputy Director of the College of New Materials and Nanotechnologies, Head of Department
of the Semiconductor Electronics and Semiconductor Physics at the MISiS

Vladimir Grigor'evich Kostishin, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Assoc. Prof.,
Head of Department of the Technology of Electronic Materials at the MISiS

Assistant Editor

Arina Aleksandrovna Kosmyrnina

EDITORIAL BOARD

- R. Kh. Akchurin**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., Moscow, Russia
A. L. Aseev, Academician of the Russian Academy of Sciences (RAS), Novosibirsk, Russia
V. T. Bublik, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., Moscow, Russia
Yu. A. Chaplygin, Corresponding Member of the Russian Academy of Sciences (RAS), Prof.,
Moscow, Russia
Yu. V. Gulyaev, Academician of the Russian Academy of Sciences (RAS), Moscow, Russia
M. Ya. Dashevskii, Prof., Moscow, Russia
A. V. Dvurechenskii, Corresponding Member of the Russian Academy of Sciences (RAS), Prof.,
Novosibirsk, Russia
A. G. Kazanskii, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Moscow, Russia
S. D. Kaloshkin, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., Moscow, Russia
S. P. Kobeleva, Cand. Sci. (Phys.–Math.), Assoc. Prof., Moscow, Russia
A. N. Kovalev, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., Moscow, Russia
L. V. Kozhitov, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., Moscow, Russia
N. S. Kozlova, Cand. Sci. (Phys.–Math.), Moscow, Russia
V. G. Litovchenko, Academician of the Ukrainian Academy of Sciences (Ukraine), Kiev, Ukraine
F. I. Manyakhin, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., Moscow, Russia
V. N. Mordkovich, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., Chernogolovka, Russia
E. K. Naimi, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., Moscow, Russia
V. M. Novotortsev, Academician of the Russian Academy of Sciences (RAS), Moscow, Russia
A. A. Orlikovskii, Academician of the Russian Academy of Sciences (RAS), Moscow, Russia
G. K. Safaraliev, Corresponding Member of the Russian Academy of Sciences (RAS), Prof.,
Makhachkala, Republic of Dagestan, Russia
N. A. Sobolev, Prof. (Aveiro, Portugal)
P. A. Todua, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., Moscow, Russia
A. K. Fedotov, Prof., Minsk, Belarus
A. Ya. Vul', Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., Saint Petersburg, Russia
H. Blanca, Prof., Oviedo, Spain
D. J. Mapps, Prof., Plymouth, United Kingdom
H.–X. Peng, Prof., Bristol, United Kingdom
L. Vazquez, Ph. D., Prof., Madrid, Spain

*In accordance with a resolution of the Higher Attestation Committee at the Ministry of Education of the Russian Federation,
the Magazine is included in the «List of Periodical and Scientific and Technical Publications Issued in the Russian Federation
in which the Publication of the Main Results of Dr.Sci. Theses is Recommended».*

МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫЙ НАУЧНО–ПРАКТИЧЕСКИЙ СЕМИНАР «МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ ЭЛЕКТРОННЫХ НАНОСТРУКТУР»

А. А. Арендаренко, В. А. Орешкин, Ю. Н. Свешников, И. Н. Цыпленков
Тенденции развития эпитаксиальной технологии нитридных соединений5

Ю. В. Федоров, С. В. Михайлович
Нитридные НЕМТ против арсенидных: последняя битва? 16

**М. Г. Ганченкова, И. А. Супрядкина, К. К. Абгарян, Д. И. Бажанов,
И. В. Мутигуллин, В. А. Бородин**
Влияние выбора параметров первопринципных расчетов на предсказания
энергетики точечных дефектов в кремнии23

А. И. Простомолотов, Н. А. Вerezуб, Х. Х. Ильясов
Дистанционное и сопряженное моделирование тепломассопереноса
и дефектообразование в технологических процессах31

К. К. Абгарян, О. В. Володина, С. И. Уваров
Математическое моделирование процессов формирования кластеров точечных дефектов
в кремнии на базе молекулярно–динамического подхода37

Д. Н. Красиков, А. В. Книжник, А. В. Гавриков, Б. В. Потапкин
Исследование путей оптимизации материалов для солнечных батарей второго поколения
методом многоуровневого моделирования.....43

К. К. Абгарян, Д. И. Бажанов, И. В. Мутигуллин
Теоретическое исследование электронных и геометрических характеристик тонких пленок AlN 48

В. А. Харченко
Проблемы надежности электронных компонентов52

МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИЯ. ПОЛУПРОВОДНИКИ

С. П. Кобелева
О природе термоакцепторов в облученном электронами высокоомном кремнии58

МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИЯ. МАГНИТНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

В. В. Мокляк
Исследования магнитных и электрических сверхтонких взаимодействий
в эпитаксиальной пленке железоиттриевого граната методом
конверсионной электронной Мёссбауэровской спектроскопии.....62

ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

**Н. Т. Павловская, П. Г. Литовченко, Ю. О. Угрин, Ю. В. Павловский,
И. П. Островский, К. Рогацкий**
Магнетосопротивление облученных протонами нитевидных кристаллов $\text{Si}_{0,97}\text{Ge}_{0,03}$ 69

АНАТОЛИЙ ВАСИЛЬЕВИЧ ДВУРЕЧЕНСКИЙ
(к 70–летию со дня рождения) 75

CONTENTS, 1(69), 2015

INTERDISCIPLINARY SCIENTIFIC AND PRACTICAL SEMINAR «MATHEMATICAL MODELING IN MATERIALS ELECTRONIC NANOSTRUCTURES»

A. A. Arendarenko, V. A. Oreshkin, Yu. N. Sveshnikov, I. N. Tsyplenkov Trends in the Development of the Epitaxial Nitride Compounds Technology.....	5—15
Yu. V. Fedorov, S. V. Mikhaylovich Nitride HEMTs VS Arsenides: the Ultimate Battle?	16—22
M. G. Ganchenkova, I. A. Supriadkina, K. K. Abgaryan, D. I. Bazhanov, I. V. Mutigullin, V. A. Borodin Influence of the ab initio Calculation Parameters on Prediction of Energy of Point Defects in Silicon	23—30
A. I. Prostomolotov, N. A. Verezub, Kh. Kh. Ilyasov Remote and Conjugated Modeling of Heat–Mass Transfer and Defect Formation in Technological Processes	31—36
K. K. Abgaryan, O. V. Volodina, S. I. Uvarov Mathematical Modeling of Point Defect Cluster Formation in Silicon Based on Molecular Dynamic Approach	37—42
D. N. Krasikov, A. A. Knizhnik, A. V. Gavrikov, B. V. Potapkin Study of Optimization Options for Second Generation Solar Cell Materials by Multilevel Modeling	43—47
K. K. Abgaryan, D. I. Bazhanov, I. V. Mutigullin Theoretical Investigation of Electronic and Structural Properties of AlN Thin Films	48—51
V. A. Kharchenko Problems of Reliability of Electronic Components	52—57

MATERIALS SCIENCE AND TECHNOLOGY. SEMICONDUCTORS

S. P. Kobeleva The Nature of Thermal Acceptors in Electron Irradiated High Resistivity Silicon.....	58—61
---	-------

MATERIALS SCIENCE AND TECHNOLOGY. MAGNETIC MATERIALS

V. V. Moklyak Study of Magnetic and Electrical Hyperfine Interactions in Yttrium Iron Garnet Films by Conversion Electron Mössbauer Spectroscopy	62—68
---	-------

PHYSICAL CHARACTERISTICS AND THEIR STUDY

N. T. Pavlovskaya, P. G. Litovchenko, Yu. O. Ugrin, Yu. V. Pavlovskiy, I. P. Ostrovskii, K. Rogacki Magnetoresistance of Proton Irradiated $\text{Si}_{0.97}\text{Ge}_{0.03}$ Whiskers	69—74
For the 70th anniversary of the birth of Anatolii Vasil'evich Dvurechenskii	75

УДК 621.315.592

ТЕНДЕНЦИИ РАЗВИТИЯ ЭПИТАКСИАЛЬНОЙ ТЕХНОЛОГИИ НИТРИДНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

© 2015 г. А. А. Арендаренко, В. А. Орешкин,
Ю. Н. Свешников, И. Н. Цыпленков
ЗАО «Элма–Малахит»,
проезд 4806, д. 2, стр. 4, Зеленоград, Москва, 124460, Россия

Введение

Уже более полутора десятков лет серьезное внимание в электронике уделяется разработке элементной базы СВЧ–техники и силовой электроники на основе нитридных соединений элементов III группы. Развитие указанных приборов (рис. 1, см. вторую стр. обложки) определено необходимостью освоения новых, более высоких частотных диапазонов, повышения их мощности и линейности характеристик, а также улучшения их эффективности [1, 2].

В настоящее время производство приборов на основе нитрида галлия находится на подходе к массовому уровню. Оно рассматривается всеми индустриально развитыми странами как магистральное направление, обеспечивающее не только совершенствование характеристик устройств на их основе (в том числе и по размерно–весовым факторам), но и решение задач по существенно–му сбережению электроэнергии и совершенствованию ее потребления, улучшению экологической обстановки.

По мнению представителей DAPRA (*Defense Advanced Research Project Agency* — Агентство перспективных исследований

МО США), существующий уровень разработок приборов СВЧ–техники на основе нитрида галлия по их параметрам, надежности и объему производства позволяет уже говорить о необходимости замены их предшественников (приборов на арсениде галлия) в СВЧ–системах, таких как базовые станции мобильной связи, тактические и спутниковые системы радиосвязи, станции активного РЭП, радиолокационные системы гражданского и военного назначения.

Достигнутые значения плотности мощности НЕМТ–транзисторов на основе нитрида галлия в 5–10 раз выше, чем у их аналогов на основе GaAs. Это обеспечивает существенное улучшение качественных характеристик СВЧ–устройств на их основе по выходной мощности, эффективности, стоимостным характеристикам (в том числе, имеется в виду, что широкий температурный рабочий интервал позволяет перейти от жидкостного охлаждения к воздушному), массогабаритным размерам (рис. 2). Так, объем сканирования радаров увеличивается в 5 раз по сравнению с радарами такого же размера на основе приборов из GaAs.

Рассмотрены основные тенденции в развитии технологии гетероструктур нитридных соединений для элементной базы СВЧ–техники и силовой электроники, а также светоизлучающих диодов. Отмечено, что важнейшим современным технологическим направлением является разработка гетероструктур нитридных соединений на подложках кремния. Рассмотрены основные проблемы гетероэпитаксии нитридных соединений на подложке кремния и пути их решения. Представлены некоторые результаты разработок технологии гетероструктур нитридных соединений на подложках кремния в ЗАО «Элма–Малахит». Гетероструктуры AlGaIn/GaN/Si выращены МОС–гидридным методом. Показано, что предэпитаксиальная обработка подложек кремния и начальная стадия процесса выращивания, включающая предварительное покрытие поверхности Si алюминием при подаче в реактор потока ТМА, играют большую роль в формировании гетероструктур, свободных от трещин и с хорошей морфологией. В то же время установлено, что форма поверхности гетероструктур определяется главным образом композицией переходной области между зародышевым слоем AlN и слоем GaN. Транзисторы, изготовленные на основе выращенных гетероструктур AlGaIn/GaN/Si, продемонстрировали приемлемые статические характеристики: максимальная плотность тока составила 800 мА/мм, пробивное напряжение — более 120 В, крутизна — 170 мСм/мм. Показано, что для дальнейшего развития гетероструктур нитридных соединений на подложках кремния экспериментально–технологическую работу необходимо организовать в тесном взаимодействии с аналитическим прогнозированием и расчетами свойств выращиваемого материала методами математического моделирования. Такой подход поможет повысить результативность разработок технологии и углубит научные представления в отношении процессов, ответственных за формирование свойств гетероструктур.

Ключевые слова: нитрид галлия, карбид кремния, сапфир, кремний, гетероструктура, подложка, гетероэпитаксия, технология.

Арендаренко Алексей Андреевич — генеральный директор, кандидат техн. наук, старший научный сотрудник, e-mail: arendarenko@elma-malachit.ru; **Орешкин Виктор Анатольевич** — начальник научно–производственной лаборатории, e-mail: oreshkin-malachit@yandex.ru; **Свешников Юрий Николаевич** — главный научный сотрудник, старший научный сотрудник, кандидат техн. наук, e-mail: sveshnikov-elma@yandex.ru; **Цыпленков Игорь Николаевич** — главный технолог, старший научный сотрудник, кандидат техн. наук, e-mail: icyplenkov@yandex.ru

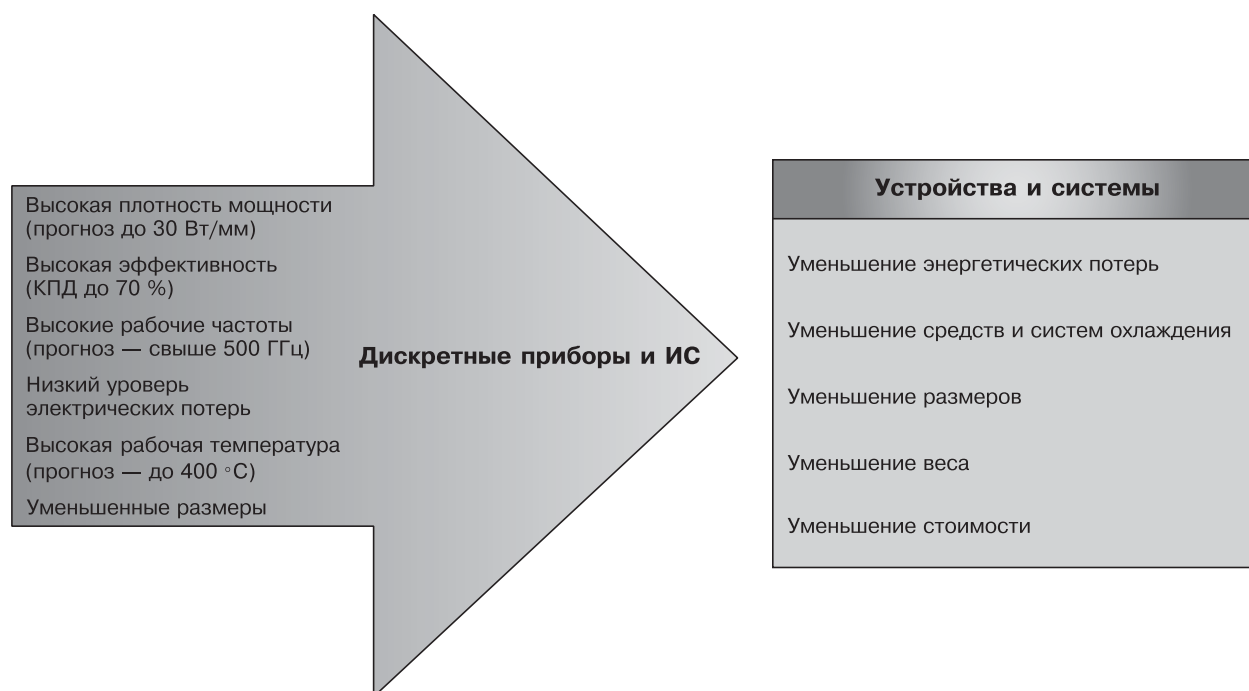


Рис. 2. Реализация свойств нитридных материалов в приборах СВЧ-техники
Fig. 2. Applications of properties of nitrides in RF devices

Разработки приборов на основе гетероструктур нитрида галлия проводятся многими крупными зарубежными компаниями (более 30). Большинство из них (Nitronex, RFMD, TriQuint, Cree (США); NEC, Toshiba, Edyna (Япония) и др.) к настоящему времени уже приступили к промышленному выпуску элементной базы для различных систем радиосвязи как гражданского, так и военного применения (рис. 3).

Представленные на рис. 3 данные не носят исчерпывающего характера, но свидетельствуют о бурном развитии технологии материалов и приборов на основе нитрида галлия для СВЧ-техники. Например, за последние два года на рынок приборов (HEMT-транзисторы и усилители мощности на их основе) вышло не менее 10 известных компаний, при этом их продукция пользуется большим спросом. Так, по сообщению Sumitomo Electric (Япония), компания к

середине 2011 г. поставила потребителям уже более 1 млн HEMT-транзисторов; компания RFHIC (США) развила объем производства усилителей мощности для LTE RRH до 10 тыс. ед./мес. К середине 2013 г. компания Cree только в сектор мобильной телефонии поставила более 2 млн транзисторов на основе нитрида галлия.

Значительные преимущества СВЧ-приборов на основе нитридных соединений по мощности, рабочим температурам, частотному диапазону делают их весьма привлекательными для создания систем связи и вооружения, в частности для наземных и бортовых АФАР (активная фазированная антенная решетка). Поэтому за рубежом эти работы активно поддерживаются на правительственном уровне. В частности, в США, помимо DARPA, финансирование этого направления осуществляется Агент-

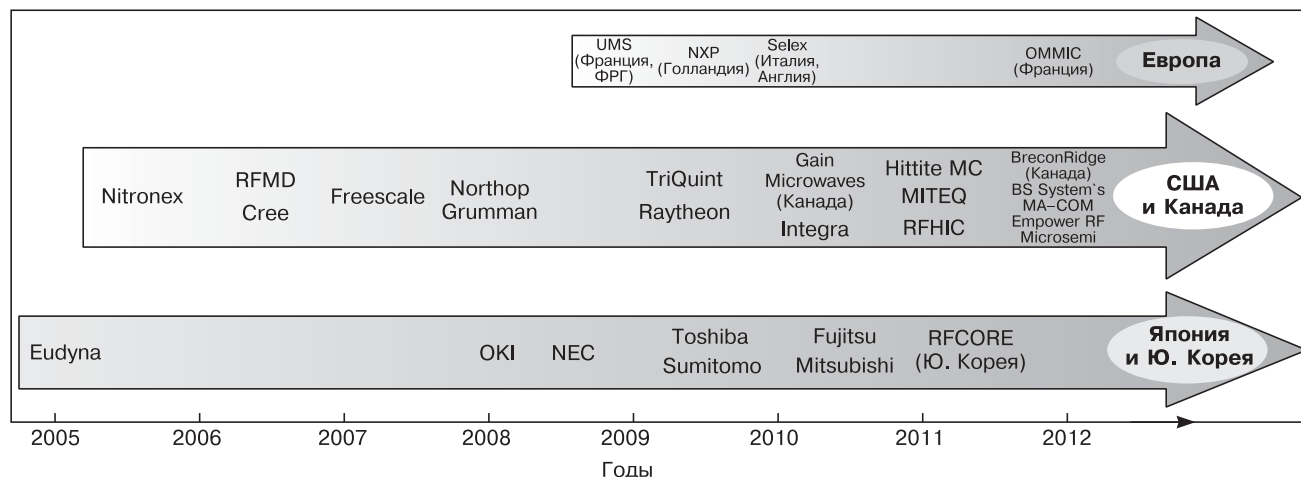


Рис. 3. Развитие производства HEMT на основе гетероструктур нитрида галлия
Fig. 3. Development of gallium nitride heterostructure based HEMT technology

ством ракетной обороны (Missile Defense Agency), военно-воздушными силами (через Исследовательскую лабораторию военно-воздушных сил — The Air Force Research Laboratory, AFRL), военно-морскими силами (через Navy EOC — Электрооптический центр военно-морских сил). В Европе выполнены крупномасштабные многонациональные проекты Korrigan, Morgan, объединившие усилия ведущих фирм и лабораторий европейских стран. Цель проектов — разработка собственной передовой GaN-HEMT-технологии, создание самостоятельной европейской структуры поставок надежных современных GaN-приборов и монолитных интегральных схем (МИС) СВЧ-диапазона, а также промышленных мощностей по их производству для обеспечения всех основных оборонных предприятий Европы. Министерство экономики, промышленности и торговли Японии также финансирует подобные проекты.

Производимая в настоящее время элементная база СВЧ-техники на основе нитрида галлия в основном предназначена для использования в устройствах Q—C—X-диапазонов частот. Однако ожидается, что в ближайшие 5 лет будет успешно преодолен рубеж в 500 ГГц. Исследовательские работы по совершенствованию как самих транзисторов на основе нитрида галлия, так и материалов для изготовления HEMT носят чрезвычайно широкий характер, и их результаты свидетельствуют о бурном прогрессе данного направления электроники. Результаты выполненных в последние годы разработок дают все основания считать этот прогноз небезосновательным. Частота отсечки экспериментальных образцов HEMT-транзисторов составляет 260 ГГц, максимальная частота осцилляций — 400 ГГц.

Направления развития производства гетероструктур

В настоящее время лидирующим по достигнутой мощности и частотным показателям можно считать приборы, изготовленные на гетероструктурах, выращенных на подложках полуизолирующего SiC. Преимуществом использования структур на таких подложках является высокая теплопроводность SiC, что позволяет обеспечивать хороший теплоотвод, определяющий в конечном счете уровень выходной мощности устройств. Однако, несмотря на большие успехи в разработке технологий получения материалов и создания приборных структур, элементные базы СВЧ-техники и особенно силовой электроники на основе нитридных соединений на подложках карбида кремния пока еще испытывают ряд затруднений в плане масштабности их использования. На это существуют определенные причины, связанные не только с вопросами технической адаптации новых приборов. В первую очередь это относится к стоимостным характеристикам последних. Высокая стоимость полуизолирующего карбида кремния является заметным

препятствием для коммерческого использования приборов на основе таких структур. Стоимостной фактор имеет очень важное значение, поскольку транзисторы на нитриде галлия предназначены не только для оснащения систем вооружения, но и для широкого круга гражданских применений. В связи с этим в последнее десятилетие проведен активный поиск альтернативы SiC как подложечного материала для выращивания гетероструктур нитрида галлия. В результате в мировой практике сформировались три основных направления в производстве нитридных гетероструктур, отличающихся материалом подложки. В промышленном производстве структур нитрида галлия применяют в основном пластины сапфира и карбида кремния; с целью уменьшения стоимости эпитаксиальных структур многие фирмы разработали, и небезуспешно, эпитаксиальные структуры GaN на кремнии. Указанные виды подложечного материала существенно отличаются от нитрида галлия по значению параметра решетки, КТР и уровню проводимости (табл. 1). Это обуславливает особенности технологии структур GaN, выражающиеся в том, что для получения гетероструктур необходимо выращивать на подложках переходные области определенной конструкции, предназначенные как для формирования полуизолирующих свойств буферных слоев, так и для компенсации возникающих в структуре напряжений.

Безусловно, в силу уникальных свойств приборов, изготавливаемых на основе гетероструктур нитридных соединений на подложках SiC, имеет место тенденция снижения стоимости этих приборов за счет увеличения размера подложечного материала и усиления конкуренции на рынке про-

Таблица 1

Характеристики подложек для эпитаксии нитридных соединений [Table 1. Characteristics of substrates for epitaxy of nitride compounds]

Параметр	Si(111)	4H-SiC	Сапфир
Стоимость (см ²), отн. ед.	1	100	10
Проводимость пластин	Проводящая	Полуизолирующая	Изолятор
Доступный диаметр пластин, дюйм	До 12	2—6	2—6
Теплопроводность, В/см · К	1,5	4,9	0,47
Рассогласование параметров кристаллических решеток относительно GaN, %	+17	-3,5	-14
Рассогласование коэффициентов термического расширения относительно GaN, %	-50	-18	+3

Примечание: «+» или «-» означает, что данный параметр больше или, соответственно, меньше аналогичного параметра GaN.

изготовителей карбида кремния. В настоящее время имеется уже несколько основных производителей высококачественных пластин высокоомного карбида кремния: Cree, WBG Materials и Dow Corning из США; SiCrystal из ФРГ; Sixon и Nippon Steel из Японии. Причем Cree, WBG Materials, Dow Corning и Nippon Steel уже освоили промышленный выпуск высококачественных пластин диаметром 4—6 дюйма (1 дюйм = 2,5 см). Тем не менее, даже с учетом выхода на рынок такого гиганта, как Nippon Steel, в силу сложности технологии SiC трудно ожидать очень серьезного удешевления пластин карбида кремния, по крайней мере в ближайшие 5 лет, а следовательно, и очень широкого распространения приборов на его основе, в первую очередь в силовой электронике.

Что касается гетероструктур нитрида галлия на подложках сапфира, то этот материал существенно дешевле, чем гетероструктуры GaN/SiC, но подложка сапфира характеризуется значительно меньшей теплопроводностью, чем карбид кремния (в 20 раз) и кремний (в 6 раз), что является сдерживающим фактором для разработки приборов, работающих при больших плотностях тока и высокой температуре.

Поэтому в последние 5 лет интенсивное развитие получило третье из упомянутых выше технологических направлений создания нитридных гетероструктур — разработка структур на подложке кремния [3—7]. Применение Si в качестве подложечного материала рассматривается как чрезвычайно перспективное направление в силу того, что потенциал данной технологии гетероструктур GaN/Si обеспечивается следующими факторами:

- доступностью высококачественных недорогих подложек диаметром до 12 дюймов;
- совместимостью со стандартным оборудованием кремниевой технологии, развитостью производственных линий по обработке пластин большого диаметра и, как следствие, уменьшением затрат на изготовление приборов;
- возможностью интеграции приборов на основе Si и нитридных материалов.

Практически все ведущие производители гетероэпитаксиальных структур нитрида галлия и приборов на их основе не оставляют без внимания данное направление. Некоторые компании, такие как Nitronex (США), OMMIC (Франция) и OKI (Япония), специализируются исключительно на производстве HEMT на основе гетероструктур Si/GaN. Так, Nitronex объявила о начале производства HEMT на основе гетероструктур GaN/Si диаметром 4 дюйма для СВЧ-техники еще в 2005 г. К 2011 г. компанией было поставлено заказчикам более 650 тыс. транзисторов, хорошо зарекомендовавших себя в соответствующих приборах, в том числе и военного назначения.

Накопленный за эти годы опыт позволил ряду компаний в течение последних 5—7 лет реализовать технологию GaN на подложках кремния диаметром

до 8 дюймов. Уже к 2006 г. на рынке появились структуры GaN/Si диаметром 4 и 6 дюймов производства компаний Picogiga (Франция), IMEC (Бельгия), Nitronex, IQE (Великобритания), Azzuro (ФРГ), NTT и Covalent Materials (Япония). Значительное число известных компаний-производителей элементной базы СВЧ-техники в настоящее время проводят разработку технологии транзисторов на основе гетероструктур GaN/Si. Часть из них, такие как упомянутые выше Nitronex, Integra Techn. (США), OMMIC (Франция) и OKI (Япония), уже осуществляют промышленный выпуск HEMT на основе рассматриваемого материала.

Согласно результатам анализа, выполненного специалистами компании Nitronex [8], производство нитридных структур на подложках кремния имеет неоспоримые преимущества по стоимости перед выпуском аналогичных структур на подложках карбида кремния. На рис. 4 приведено сравнение стоимости 1 мм² нитридных структур на различных подложках в зависимости от объема производства. Расчет выполнен из предположения, что стоимость изготовления гетероструктур GaN/Si и GaN/SiC и выход годных соответствующих приборов одинаковы. Здесь следует заметить, что вследствие присутствия дефектов «*micropipes*» в карбиде кремния выход годных приборов на основе гетероструктур GaN/SiC может быть ниже.

Из данных, приведенных на рис. 4, видно, что конкурентные преимущества гетероструктур GaN/Si по их стоимости будут возрастать при увеличении объема выпуска продукции и при переходе на большие диаметры подложек. Очевидно также, что меньшая стоимость материала будет стимулировать его использование для других возможных применений, например для производства силовой и автомобильной электроники.

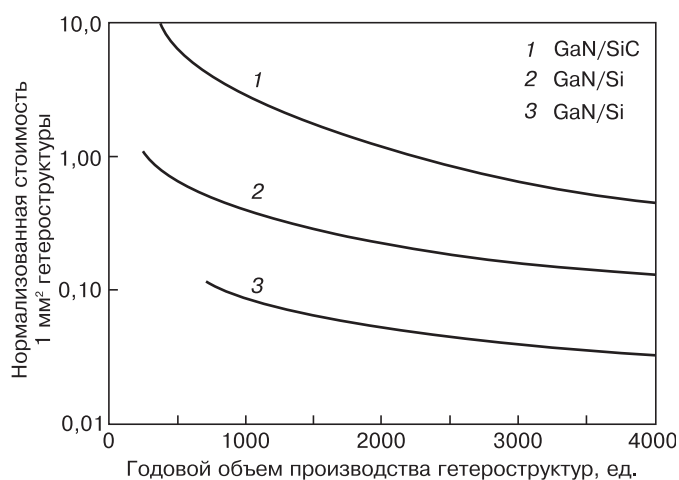


Рис. 4. Сопоставление стоимости 1 мм² нитридных структур на подложках SiC и Si в зависимости от объема производства [8]:

1 — Ø 3 дюйма; 2 — 4; 3 — 6

Fig. 4. Comparison of cost between 1 mm² of nitride structures on SiC and Si substrates for different production scales: (1) 3", (2) 4" and (3) 6"



Рис. 5. Развитие производства нитридных гетероструктур на подложке кремния для светодиодов

Fig. 5. Development of technology of nitride heterostructures on silicon substrates for LEDs

Результаты надежных испытаний приборов на основе GaN/Si, которые были опубликованы в ряде работ, показали, что приборы на основе этих гетероструктур являются достойными конкурентами в разнообразных системах связи гораздо более дорогих приборов на основе гетероструктур, выращенных на подложках карбида кремния [8—11].

Необходимо отметить, что, помимо СВЧ-техники, технология нитридных гетероструктур на подложке кремния по причинам, отмеченным выше, уже активно осваивается и в производстве светодиодов [12—15] (рис. 5). На рис. 6 в качестве примера показана тенденция изменения стоимости чипа прибора при переходе производства светодиодов на использование нитридных гетероструктур на подложке кремния диаметром 200 мм.

Только технология нитридных гетероструктур на подложке кремния предоставляет возможность, основываясь на уникальных свойствах нитридов III группы в сочетании с приемлемой стоимостью этих материалов на подложке Si, качественного преобразования электронной компонентной базы силовой электроники [1, 17—19]. Область применения нитридных гетероструктур на подложке кремния в приборах силовой электроники представлена на рис. 7.

Таким образом, можно с уверенностью констатировать, что технология гетероструктур на подложке кремния уже состоялась как главное направление в удешевлении приборов на основе GaN для разных видов применения.

Проблемы технологии гетероструктур на подложке Si

Основная проблема технологии гетероструктур GaN/Si состоит в том, что нитрид галлия и кремний

имеют очень большие различия в значениях параметра решетки и коэффициентов термического расширения (см. табл. 1). Для сравнения: при $T = 300$ К различие в параметрах решеток составляет 17 %, а при температуре роста эпитаксиальных слоев $T = 1000$ К эта величина составляет 40 %. При этом коэффициент термического расширения для Si на 50 % меньше, чем для GaN, что приводит к формированию в эпитаксиальном слое при комнатной температуре сильных растягивающих термонапряжений, обуславливающих значительный прогиб гетероструктур, особенно выраженный при их большом диаметре. Результатом формирования растягивающих напряжений является растрескивание слоя нитрида

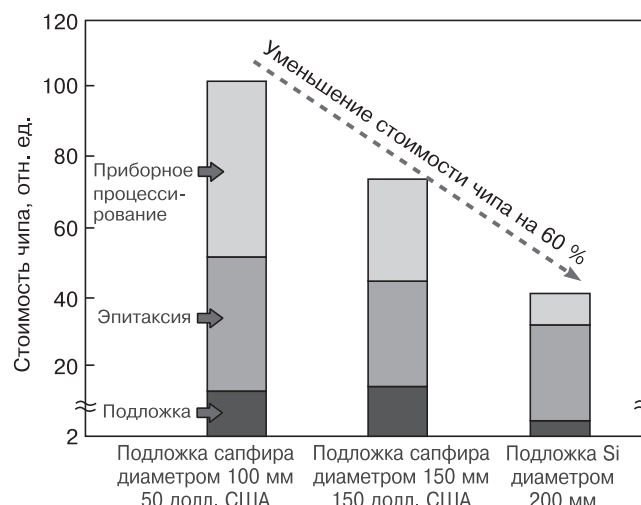


Рис. 6. Тенденция изменения стоимости чипа прибора при переходе производства светодиодов на использование нитридных гетероструктур на подложке кремния диаметром 200 мм [16]

Fig. 6. Trend of device chip cost in case of LED technology transfer to the use of nitride heterostructure on 200 mm diam. silicon substrates [16]

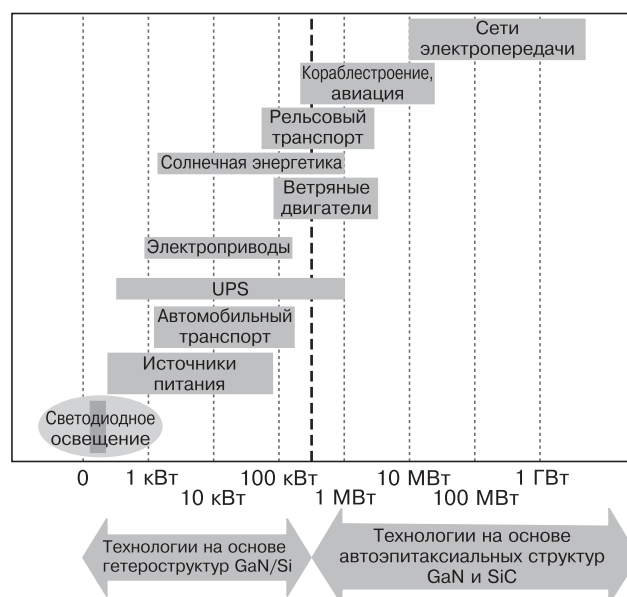


Рис. 7. Области применения нитридных гетероструктур на подложке кремния в приборах силовой электроники [19]

Fig. 7. Applications of nitride heterostructures on silicon substrates in high power electronics [19]

галлия вдоль направлений $\{1\bar{1}00\}$ при толщине слоя более 1 мкм. Эту проблему устраняют главным образом посредством введения в композицию гетероструктуры переходных слоев, предназначенных для компенсации растягивающих напряжений.

Необходимо отметить, что в научно–технической литературе представлено множество примеров состава переходных слоев, позволяющих с той или иной степенью успеха решить проблему растрескивания слоев нитрида галлия в гетероструктурах GaN/Si. Самые результативные из них представляют ноу–хау, и их детали не описываются. Тем не менее можно заключить, что базовым элементом переходных слоев являются слои AlN и AlGaIn, характеризующиеся меньшим значением параметра решетки, чем нитрид галлия. Слои отмеченных соединений наноразмерного уровня в разных исследованиях представлены в составе композиции переходного слоя в различных сочетаниях (примеры композиции переходных областей представлены на рис. 8), в том числе и в виде напряженных сверхрешеток (SLS) типа AlN/GaN и AlGaIn/GaN [20].

Различие в параметрах решеток нитрида галлия и кремния обуславливает также формирование напряжений в процессе роста, которые приводят к изгибу системы «эпитаксиальный слой — подложка» и к растрескиванию эпитаксиальных слоев при превышении их критической толщины.

Однако остаточные напряжения, сформированные в процессе роста, наряду с напряжениями, обусловленными различием коэффициентов термического расширения, могут играть значительную роль в конечных свойствах гетероструктуры. С целью снижения уровня остаточных напряжений в слоях нитрида галлия часто используют введение в состав переходной области слоя AlN толщиной 10–100 нм, выращенного при низких температурах (см. рис. 8, слой LT AlN) [22]. По мнению авторов работы [12], низкотемпературный (600–800 °C) слой AlN вырастает некогерентно, но сохраняет эпитаксиальную симметрию, т. е. поддерживается ориентация в а– и

с–направлениях. Хотя механизм влияния этого слоя до конца неясен, отмечается, что он осуществляет «развязку» по напряжениям между выше– и ниже–лежащими слоями гетероструктуры [12].

Технологическую задачу при получении гетероструктур нитридных соединений на подложках кремния можно в целом определить так, как представлено на рис. 9 (см. вторую стр. обложки). Как правило, начальным этапом процесса получения гетероструктуры является рост слоя AlN, а последующая область структуры формируется таким образом, чтобы в процессе роста создать напряжения сжатия, в той или иной степени компенсирующие растягивающие напряжения, которые возникают при охлаждении.

Как уже отмечалось выше, решение этой задачи в принципе носит эмпирический характер. В последние годы этот процесс проходит с привлечением современных аналитических методов контроля процесса роста *in situ*, особенно успешно разработанных компанией Lay Tec (ФРГ). Оптические методы, предложенные этой компанией и ставшие в настоящее время неотъемлемой частью современного технологического оборудования, позволяют осуществлять на основе анализа характеристик отраженного от поверхности растущей структуры излучения разных длин волн контроль скорости роста слоев и формы поверхности гетероструктуры в любой момент ее образования. Пример записи изменения геометрии гетероструктуры для светоизлучающих диодов в процессе ее получения представлен на рис. 10.

Как видно из приведенного на рис. 10 примера, конечный вид геометрии структуры можно менять посредством изменения толщины слоев и их состава, добиваясь в конечном итоге нужного результата (минимального коробления структуры при отсутствии растрескивания). Таким образом, посредством тщательного подбора условий формирования и композиции переходных слоев удалось найти решение проблем, определяющих систему напряжений в гетероструктуре и обуславливающих посредством этого

Рис. 8. Примеры композиций переходных областей гетероструктур GaN/Si:

а, б, в — данные работы [20]; г — [21].

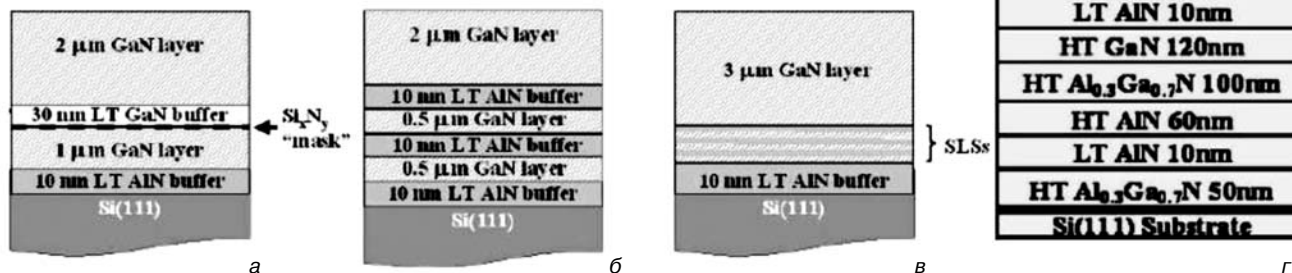
LT, HT — слои, полученные при низко– и высокотемпературном осаждении соответственно;

MQW (multiquantum–well structure) — структура со множественными квантовыми ямами

Fig. 8. Examples of compositions of GaN/Si heterostructure transition regions: (a–c) data of [20] and (d) data of [21].

LT/HT layers synthesized by low and high temperature deposition respectively;

MQW = multiquantum–well structure



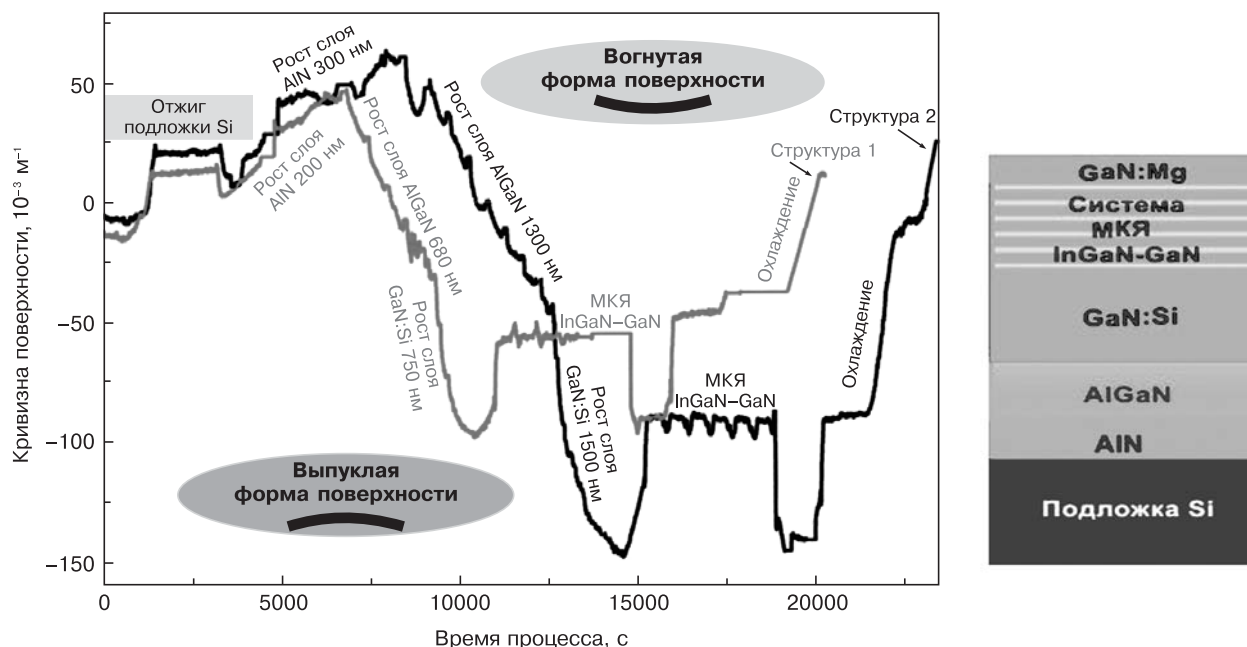


Рис. 10. Формирование геометрии гетероструктур нитридных соединений при росте на подложке кремния [23]
Fig. 10. Formation of nitride heterostructure pattern on silicon substrates [23]

возможность получения нитридных гетероструктур на подложке кремния с приемлемой величиной прогиба и с толщиной слоев до 4 мкм без их растрескивания. Такие приемы, являющиеся в значительной мере секретами фирмы, разработаны в компаниях Nitronex, Soitec Group (США), Oki Electronics (Япония). Более того, разработки компании Bridgelux (США) показали возможность изготовления гетероструктур нитрида галлия на подложках кремния диаметром 8 дюймов с полным отсутствием прогиба при комнатной температуре.

Технология гетероструктур на подложке Si в России

В нашей стране технология гетероструктур нитридных соединений на подложке кремния находится в стадии своего становления. В ЗАО «Элма-Малахит» впервые проведены успешные разработки нитридных гетероструктур для СВЧ-полевых транзисторов, связанные с использованием подложек кремния. К сожалению, отсутствие современного оборудования, рассчитанного на подложки большого диаметра, обусловило разработку гетероструктур диаметром 2 дюйма. Однако даже в этом случае результаты выполненной работы представляются чрезвычайно полезными, поскольку позволили предприятиям страны приступить к исследованию и разработке новых перспективных видов приборов.

Основные аспекты исследования состояли в следующем.

1. Подготовка подложек кремния.
2. Начальная стадия формирования гетероструктуры.
3. Рост слоя AlN.

4. Оптимизация переходной области $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.
5. Формирование гетероструктуры AlGaIn/GaN.
6. Испытания при изготовлении HEMT.

Для получения гетероструктур применяли МОС-гидридный метод эпитаксии. В качестве источников элементов III группы использовали триметилгаллий (ТМГ) и триметилалюминий (ТМА), источник азота — аммиак. Процессы проводили в водородно-азотной среде при давлении в реакторе 60—100 мм рт. ст. и температуре роста 1000—1050 °C. В качестве подложек применяли пластины высокоомного (с удельным электрическим сопротивлением $\rho > 10^4 \text{ Ом} \cdot \text{см}$) кремния диаметром 2 дюйма с ориентацией (111).

В настоящее время практически все применяемые технологии основаны на том, что рост GaN на подложках Si происходит с использованием буферного слоя AlN, так как, во-первых, слой AlN предотвращает непосредственный контакт Ga с Si и реакции взаимодействия, а во вторых — буферный слой AlN позволяет сгладить градиент напряжений при переходе к росту слоя GaN, что приводит к снижению плотности дислокаций в эпитаксиальном слое GaN. Поэтому базовая композиция гетероструктуры состояла из начального слоя AlN и трехслойной переходной области на основе сочетания слоев AlGaIn различного состава и толщины, поверх которой выращивали слой GaN толщиной 1,2 мкм и барьерный слой $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{N}$ толщиной 25 нм.

В ходе исследований изучали влияние различных технологических факторов на структурное совершенство и геометрические характеристики полученных структур, а также на их электрофизические параметры.

Исследование влияния предэпитаксиальной обработки подложек Si на структурное совершенство гетероструктур показало, что независимо от способов ее проведения структурное совершенство полученных структур значительно выше, чем при использовании необработанных подложек. Так, ширина кри-вых рентгеновской дифракции на половине высоты

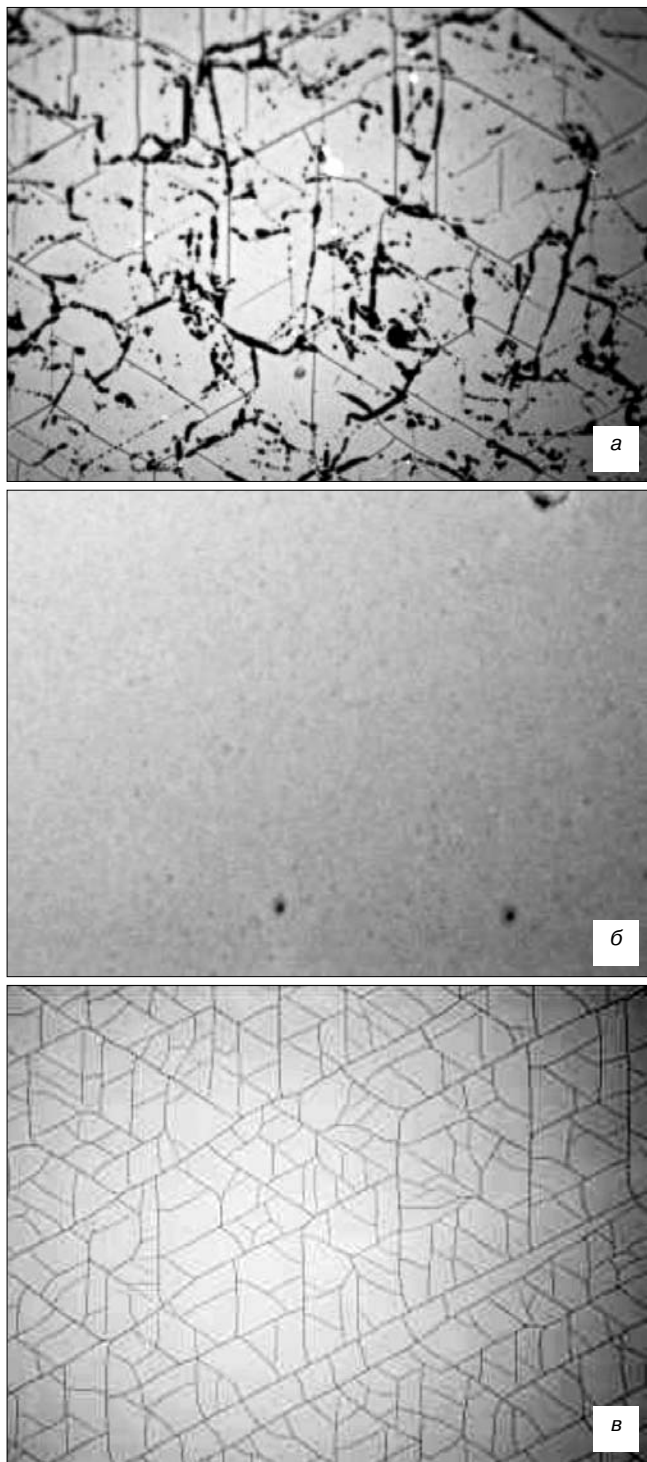


Рис. 11. Зависимость вида поверхности гетероструктур AlGaIn/GaN на подложке кремния от времени обработки Si в парах ТМА:

а — 0,1 мин; б — 0,2; в — 0,5

Fig. 11. Surface pattern of AlGaIn/GaN heterostructures on silicon substrates as a function of time of Si treatment in the vapors: (a) 0.1 min, (b) 0.2 min and (c) 0.5 min

пики (ПШКК) для отражения (002) в серии процессов составляла 580—620" для структур на обработанных подложках и 670—750" для структур, выращенных на подложках, которые не прошли обработку.

В большинстве случаев росту первого слоя AlN на подложке кремния предшествует не только термический отжиг подложки в реакторе, но и предварительное покрытие ее поверхности алюминием (порядка монослоя) при подаче в реактор потока ТМА. Оптимизация этой стадии процесса имеет большое значение [24]. В проведенных авторами экспериментах длительность подачи ТМА в реактор изменялась от 0 до 0,5 мин. Анализ полученных структур показал, что период 0,2 мин является оптимальным для используемого потока алюминия (50 мкмоль/мин). При меньшем времени покрытия наблюдается большое число трещин и почернение периферии структуры, а также сильно развитый рельеф поверхности; большее время обработки вызывает появление трещин по всей поверхности пластины (рис. 11).

Важное значение для последующего использования структур в процессах изготовления приборов имеет форма рабочей поверхности. Так, в приведенных в работе процессах при использовании переходной области, состоящей из трех слоев AlGaIn, суммарная толщина которой изменялась от 0,5 до 1,0 мкм, получался вогнутый профиль структуры. Коробление при этом достигало 50 мкм. Более заметный эффект управления внутренними напряжениями в ходе роста структуры (и, следовательно, конечной ее геометрии) был получен при использовании переходной области, состоящей из шести слоев AlGaIn, имеющей ту же суммарную толщину. В этом случае можно было получить даже выгнутые структуры, коробление которых зависело уже от толщины слоя GaN, выращенного на поверхности переходной области. Характер изменения геометрии структур, выращенных в различных режимах, приведен на рис. 12 (см. вторую стр. обложки). При оптимальном соотношении всех элементов структуры значение прогиба составляло ~2 мкм.

Измерения электрофизических характеристик полученных структур показало, что в отработанных режимах значение подвижности электронов в двумерном электронном газе составляло порядка 1500—1750 см²/(В·с) при слоевой концентрации $(1\text{—}1,2) \cdot 10^{13}$ см⁻² (рис. 13), что уступает параметрам, полученным на этом же оборудовании в структурах на подложках карбида кремния ($\mu \sim 2000\text{--}2200$ см²/(В·с) при этой же слоевой концентрации носителей заряда). Тем не менее структуры пригодны для изготовления НЕМТ.

Сформированные на структурах тестовые транзисторы имели Ni—Al—Ti—затвор длиной 0,8 мкм и шириной 100 мкм. Омические контакты формировали вжиганием при 720 °С композиции Ti—Al—Ni—Au. Изоляцию осуществляли с помощью мез, полученных методом плазмохимического травления

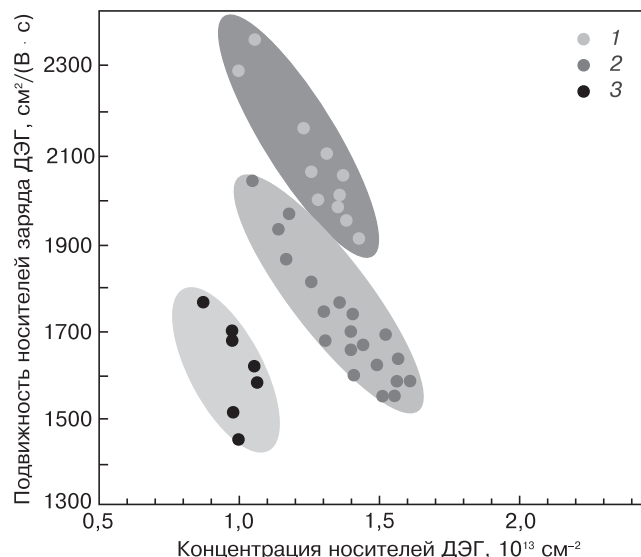


Рис. 13. Электрофизические параметры гетероструктур AlGaIn/GaN на различных видах подложек:

1 — SiC; 2 — Al₂O₃; 3 — Si

Fig. 13. Electrical properties of AlGaIn/GaN heterostructures on different types of substrates: (1) SiC, (2) Al₂O₃ and (3) Si

в Cl-содержащей плазме. Всю структуру пассивировали плазменным Si₃N₄ толщиной 0,5 мкм. Измерения статических характеристик показали, что максимальная плотность тока в транзисторах составила 800 мА/мм, пробивное напряжение — более 120 В, крутизна — 170 мСм/мм, что демонстрирует высокий потенциал разрабатываемого подхода к созданию нитридных гетероэпитаксиальных структур на подложках кремния [25].

Дальнейшее совершенствование технологии гетероструктур AlGaIn/GaN на подложке Si ЗАО «Элма–Малахит» связывает с проведением работ по оптимизации системы напряжений в структуре переходной области. Конечно, для успешного решения этой задачи необходимо, как показывает опыт зарубежных разработок, осуществление контроля

Таблица 2

Этапы разработки технологии нитридных соединений на подложках кремния [26]

[Table 2. Stages of development of technology of nitride compounds on silicon substrates [26]]

Этап	Производство структур Ø 6", шт/год	Длительность этапа, годы
Исследования	не более 1000	5—10
Разработка и создание прототипа	1000—2000	2—3
Квалификация	3000—5000	3—5
Расширение производства	более 10000	1
Массовое производство	более 50000	—
Общее время развития производства от прототипа до массового выпуска		6—9

процесса формирования структуры *in situ*. В этом отношении имеются очевидные перспективы, поскольку компания Lau Tec (ФРГ) смогла разработать систему оптического контроля, позволяющую осуществлять одновременное измерение *in situ* температуры структур, скорости их роста, значения и знака прогиба.

Необходимо подчеркнуть, что в силу сложности технологии получения гетероструктур нитридных соединений на подложках кремния процесс ее разработки достаточно материалоемкий и длительный. В табл. 2 представлены результаты анализа этапов разработки технологии нитридных соединений на подложках кремния ряда ведущих зарубежных компаний [26].

Как следует из приведенных в табл. 2 данных, длительность периода развития технологии до выхода на массовое производство составляет 6—9 лет. При этом следует иметь в виду отличную оснащенность зарубежных компаний технологическим и аналитическим оборудованием, а также значительный уровень инвестиций в это направление. Для сокращения имеющегося разрыва между уровнем зарубежных и отечественных разработок, по крайней мере в отношении качественных характеристик гетероструктур нитридных соединений на подложках кремния, экспериментально-технологическую работу необходимо организовать в тесном взаимодействии с аналитическим прогнозированием и расчетами свойств выращиваемого материала методами математического моделирования. Такой подход поможет повысить результативность разработок технологии и углубит научные представления в отношении процессов, ответственных за формирование свойств гетероструктур.

Заключение

Рассмотрены основные тенденции в развитии технологии гетероструктур нитридных соединений для элементной базы СВЧ-техники и силовой электроники, а также светоизлучающих диодов. Отмечено, что важнейшим современным технологическим направлением является разработка гетероструктур нитридных соединений на подложках кремния. Рассмотрены основные проблемы гетероэпитаксии нитридных соединений на подложке кремния и пути их решения.

Представлены некоторые результаты разработок технологии гетероструктур нитридных соединений на подложках кремния в ЗАО «Элма–Малахит». Гетероструктуры AlGaIn/GaN/Si выращены МОС-гидридным методом. Показано, что предэпитаксиальная обработка подложек кремния и начальная стадия процесса выращивания, включающая предварительное покрытие поверхности Si алюминием при подаче в реактор потока ТМА, играют большую роль в формировании гетероструктур, свободных

от трещин и с хорошей морфологией. В то же время установлено, что форма поверхности гетероструктур определяется главным образом композицией переходной области между зародышевым слоем AlN и слоем GaN. Транзисторы, изготовленные на основе выращенных гетероструктур AlGaIn/GaN/Si, продемонстрировали приемлемые статические характеристики: максимальная плотность тока составила 800 мА/мм, пробивное напряжение — более 120 В, крутизна — 170 мСм/мм.

Показано, что для дальнейшего развития гетероструктур нитридных соединений на подложках кремния экспериментально-технологическую работу необходимо организовать в тесном взаимодействии с аналитическим прогнозированием и расчетами свойств выращиваемого материала методами математического моделирования. Такой подход поможет повысить результативность разработок технологии и углубит научные представления в отношении процессов, ответственных за формирование свойств гетероструктур.

Библиографический список

1. Okumura, H. Present status and future prospect of widegap semiconductor high-power devices / H. Okumura // Jap. J. Appl. Phys. – 2006. – V. 45, N. 10A. – P. 7565–7586.
2. Anwar, A. Compound Semiconductor Markets: Current Status and Future. Report of Strategy Analytics. 2012. <http://www.strategyanalytics.com>
3. Azam, S. Comparison of two GaN transistor technologies in broadband power amplifiers / S. Azam, C. Svensson, Q. Wahab, R. Jonsson // Microwave J. – 2010. – V. 53, N 4. – P. 184–192.
4. Sun, H. Ultrahigh-speed AlInN/GaN high electron mobility transistors grown on (111) high-resistivity silicon with $f_T = 143$ GHz / H. Sun, A. R. Alt, H. Benedickter, C. R. Bolognesi, E. Feltin, J.-F. Carlin, M. Gonschorek, N. Grandjean // Appl. Phys. Express. – 2010. – V. 3. – P. 094101–1–094101–3.
5. Medjdoub, F. Effects of AlGaIn back barrier on AlN/GaN-on-silicon high-electron-mobility transistors / F. Medjdoub, M. Zegaoui, B. Grimbert, N. Rolland, P.-A. Rolland // Appl. Phys. Express. – 2011. – V. 4. – P. 124101–1–124101–3.
6. Cheng, K. AlGaIn/GaN/AlGaIn double heterostructures grown on 200 mm silicon (111) substrates with high electron mobility / K. Cheng, H. Liang, M. Van Hove, K. Geens, B. De Jaeger, P. Srivastava, X. Kang, P. Favia, H. Bender, S. Decoutere, J. Dekoster, J. I. del Agua Bornique, S. W. Jun, H. Chung // Appl. Phys. Express. – 2012. – V. 5. – P. 011002–1–011002–3.
7. Marcon, D. Excellent stability of GaN-on-Si high electron mobility transistors with 5 μ m gate-drain spacing tested in off-state at a record drain voltage of 200 V and 200 °C / D. Marcon, M. Van Hove, D. Visalli, J. Derluyn, J. Das, F. Medjdoub, S. Degroote, M. Leys, K. Cheng, R. Mertens, M. Germain, G. Borghs // Jap. J. Appl. Phys. – 2010. – V. 49. – P. 04DF07–1–04DF07–4.
8. Application note AN-011: Substrates for GaN RF devices. – Nitronex corporation, 2008. http://www.richardsonrfd.com/resources/RelDocuments/SYS_16/Nitronex_Substrates_for_GaN_RF_Devices_App%20Notes.pdf
9. Ikeda, N. High-power GaN HFETs on Si substrate / N. Ikeda, J. Li, K. Kato, Sh. Kaya, T. Kazama, T. Kokawa, Y. Sato, M. Iwami, T. Nomura, M. Masuda, S. Kato // Furukawa Rev. – 2008. – N 34. – P. 17–23.
10. Gajewski, D. A. HEMT MMIC technology on 100-mm 4H-SiC / D. A. Gajewski, S. Sheppard, T. McNulty, J. B. Barner, J. Milligan, J. Palmour // 26th Annual JEDEC ROCS Workshop. – Indian Wells (CA, USA), 2011. – P. 141–142.
11. Wallis, D. J. 2 dimensional electron gas uniformity of GaN HEMT layers on SiC / D. J. Wallis, P. J. Wright, D. E. J. Soley, L. Koker, M. J. Uren, T. Martin // J. Cryst. Growth. – 2012. – V. 338, N 1. – P. 125–128.
12. Krost, A. Blue optoelectronics in III–V Nitrides on Silicon / A. Krost, A. Dadgar // Acta Physica Polonica A. – 2002. – V. 102, N 4–5. – P. 555–566.
13. Dadgar, A. Epitaxy of GaN LEDs on large substrates: Si or sapphire? / A. Dadgar, C. Hums, A. Diez, F. Schulze, J. Bläsing, A. Krost // Proc. of SPIE. – 2006. – V. 6355. – P. 63550R–1–63550R–8.
14. Zhu, Y. High performance of GaN-based light emitting diodes grown on 4-in. Si(111) substrate / Y. Zhu, A. Watanabe, L. Lu, Z. Chen, T. Egawa // Jap. J. Appl. Phys. – 2011. – V. 50. – P. 04DG08–1–04DG08–3.
15. Egawa, T. High performance InGaIn LEDs on Si(111) substrates grown by MOCVD / T. Egawa, B. A. Bakar A. Shuhaimi // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2010. – V. 43. – P. 354008 (8 pp).
16. GaN-on-Si. Report of Yole Development, 2014. <http://www.yole.fr>
17. Briere, M. A. GaN based power devices: Cost-effective revolutionary performance / M. A. Briere // Power Electronics Europe. – 2008. – N 7. – P. 29–31.
18. Baliga, B. J. Gallium nitride devices for power electronic applications / B. J. Baliga // Semicond. Sci. Technol. – 2013. – V. 28. – P. 074011.
19. Power GaN. Report of Yole Development, 2010. <http://www.yole.fr>
20. Hageman, P. R. Growth of GaN epilayers on Si (111) substrates using multiple buffer layers / P. R. Hageman, S. Haffouz, A. Grzegorzczk, V. Kirilyuk, P. K. Larsen // Mat. Res. Soc. Symp. Proc. – 2001. – V. 693. – P. 13.20.1–13.20.6.
21. Hsu, Y. P. Crack-free high-brightness InGaIn/GaN LEDs on Si (111) with initial AlGaIn buffer and two LT-Al interlayers / Y. P. Hsu, Y. P. Chang, W. S. Chen, J. K. Sheu, J. Y. Chu, C. T. Kuo // J. Electrochem. Soc. – 2007. – V. 154, N 3. – P. H191–H193.
22. Dadgar, A. Improving GaN-on-silicon properties for GaN device epitaxy / A. Dadgar, T. Hempel, J. Bläsing, O. Schulz, S. Fritze, J. Christen, A. Krost // Physica status solidi (c). – 2011. – V. 8, iss. 5. – P. 1503–1508.
23. Zhu, D. Low-cost high-efficiency GaN LED on large-area Si substrate / D. Zhu, C. J. Humphreys // CS MANTECH Conf. – New Orleans (Louisiana, USA), 2013. – P. 269–272. <http://www.csmantech.org/Digests/2013/papers/078.pdf>
24. Cao, J. The influence of the Al pre-deposition on the properties of AlN buffer layer and GaN layer grown on Si (111) / J. Cao, Sh. Li, G. Fan, Y. Zhang, Y. Y. Zheng, J. Huang, J. Su // J. Cryst. Growth. – 2010. – V. 312, N 14. – P. 2044–2048.
25. Арендаренко, А. А. Некоторые особенности выращивания гетероструктур AlGaIn/GaN на подложках кремния для СВЧ-транзисторов / А. А. Арендаренко, И. Г. Ермошин, В. А. Орешкин, Ю. Н. Свешников, И. Н. Цыпленков, В. И. Гармаш, В. И. Егоркин, В. Е. Земляков, Л. Г. Литош // Сб. тез. 9-й Всероссийской конф. «Нитриды галлия, индия, алюминия — структуры и приборы». – М.: МГУ, 2013. – С. 78–79.
26. Stevenson, R. Analysts are tipping tremendous growth for the compound semiconductor industry / R. Stevenson // Compound Semiconductor. – 2012. – V. 18, N 3. – P. 14–19.

Статья написана по материалам междисциплинарного научно-практического семинара «Математическое моделирование в материаловедении электронных наноструктур», проведенного в ВЦ РАН имени А. А. Дородницына

Статья поступила в редакцию 25 декабря 2014 г.

Trends in the Development of the Epitaxial Nitride Compounds Technology

Aleksei Andreevich Arendarenko — Cand. Sci. (Eng.), Senior Researcher, Director General (arendarenko@elma-malachit.ru); **Viktor Anatolevich Oreshkin** — Head of Research and Production Laboratory (oreshkin-malachit@yandex.ru); **Yurii Nikolaevich Svshnikov** — Cand. Sci. (Eng.), Chief Researcher, Senior Researcher (svshnikov-elma@yandex.ru); **Igor Nikolaevich Tsyplenkov** — Cand. Sci. (Eng.), Production Manager, Senior Researcher (icyplenkov@yandex.ru).

«Elma-malachit» JSC,

4806 Road, blok 2, building 4, Moscow, Zelenograd
124460, Russia

Abstract. The main trends in the development of technology for nitride heterostructures element base of microwave-technology and power electronics, as well as light-emitting diodes have been reviewed. It has been noted that most modern technological focus is the development of nitride heterostructures on silicon substrates. The basic problems of nitride compounds on silicon substrate and the ways of their solution have been discussed.

Some results of GaN/Si heterostructures technology development in «Elma-Malachit» JSC have been presented. The AlGaIn/GaN/Si heterostructures have been grown by MOCVD. We show that early process stages such as Si-surface treatment and Al pre-deposition are of great importance for the growth of crack-free structures with good structural and surface quality. Meanwhile the surface curvature of the grown structures is influenced mainly by the composition of multilayered transition region between the AlN nucleation layer and the GaN layer. Transistors fabricated on AlGaIn/GaN structures grown on Si substrates under optimized conditions demonstrated rather good static characteristics: $I_{d,max} = 800$ mA/mm, $U_{br} > 120$ V, $g_m = 170$ mS/mm.

For the further technology development experimental and technological work should be arranged in close coordination with analytical prediction and calculation of properties of the grown material with mathematical modeling methods. This approach will help enhance the efficiency of technology development and deepen scientific views on the processes responsible for the formation of properties of heterostructures.

Key words: gallium nitride, silicon carbide, silicon, supphire, heterostructure, substrate, heteroepitaxy, technology.

References

- Okumura H. Present status and future prospect of widegap semiconductor high-power devices. *Japan Journal of Applied Physics*. 2006, vol. 45, no. 10A, pp. 7565–7586. doi: 10.1143/JJAP.45.7565
- Anwar A. Compound semiconductor markets: Current status & future. *Report of Strategy Analytics*, 2012, www.strategyanalytics.com
- Azam S., Svensson C., Wahab Q., Jonsson R. Comparison of two GaN transistor technologies in broadband power amplifiers. *Microwave Journal*. 2010, vol. 53, no. 4, pp. 184–192.
- Sun H., Alt A. R., Benedickter H., Bolognesi C. R., Felten E., Carlin J.-F., Gonschorek M., Grandjean N. Ultrahigh-speed AlInN/GaN high electron mobility transistors grown on (111) high-resistivity silicon with FT = 143GHz. *Applied Physics Express*. 2010, vol. 3, pp. 094101–1–094101–3. doi: 10.1143/APEX.3.094101
- Medjdoub F., Zegaoui M., Grimbart B., Rolland N., Rolland P.-A. Effects of AlGaIn back barrier on AlN/GaN-on-silicon high-electron-mobility transistors. *Applied Physics Express*. 2011, vol. 4, pp. 124101–1–124101–3. doi: 10.1143/APEX.4.124101
- Cheng K., Liang H., Van Hove M., Geens K., De Jaeger B., Srivastava P., Kang X., Favia P., Bender H., Decoutere S., Dekoster J., del Agua Bornique J. I., Jun S. W., Chung H. AlGaIn/GaN/AlGaIn double heterostructures grown on 200 mm silicon (111) substrates with high electron mobility. *Applied Physics Express*. 2012, vol. 5, pp. 011002–1–011002–3. doi: 10.1143/APEX.5.011002
- Marcon D., Van Hove M., Visalli D., Derluyn J., Das J., Medjdoub F., Degroote S., Leys M., Cheng K., Mertens R., Germain M., Borghs G. Excellent stability of GaN-on-Si high electron mobility transistors with 5 μ m gate-drain spacing tested in off-state at a record drain voltage of 200 V and 200 °C. *Japan Journal of Applied Physics*. 2010, vol. 49, pp. 04DF07–1–04DF07–4. doi: 10.1143/JJAP.49.04DF07
- Nitronix Corporation. Substrates for GaN RF devices. *Application note AN-011*. 2008. http://www.richardsonrfd.com/resources/RelDocuments/SYS_16/Nitronex_Substrates_for_GaN_RF_Devices_App%20Notes.pdf
- Ikeda N., Li J., Kato K., Kaya Sh., Kazama T., Kokawa T., Sato Y., Iwami M., Nomura T., Masuda M., Kato S. High-power GaN HFETs on Si substrate. *Furukawa Review*. 2008, no. 34, pp. 17–23.
- Gajewski D. A., Sheppard S., McNulty T., Barner J. B., Milligan J., Palmour J. Reliability of GaN/AlGaIn HEMT MMIC technology on 100-mm 4H-SiC. *26th Annual JEDEC ROCS Workshop*. Indian Wells (CA, USA), 2011. pp. 141–142.
- Wallis D. J., Wright P. J., Soley D. E. J., Koker L., Uren M. J., Martin T. 2 dimensional electron gas uniformity of GaN HEMT layers on SiC. *Journal of Crystal Growth*. 2012, vol. 338, no. 1, pp. 125–128.
- Krost A., Dadgar A. Blue optoelectronics in III–V nitrides on silicon. *Acta Physica Polonica A*. 2002, vol. 102, no. 4–5, pp. 555–566.
- Dadgar A., Hums C., Diez A., Schulze F., Blasing J., Krost A. Epitaxy of GaN LEDs on large substrates: Si or sapphire? *Proceedings of SPIE*. 2006, vol. 6355, pp. 63550R–1–63550R–8. doi: 10.1117/12.691576
- Zhu Y., Watanabe A., Lu L., Chen Z., Egawa T. High performance of GaN-based light emitting diodes grown on 4-in. Si(111) substrate. *Japan Journal of Applied Physics*. 2011, vol. 50, pp. 04DG08–1–04DG08–3. doi: 10.1143/JJAP.50.04DG08
- Egawa T., Bakar B. A., Shuhaimi A. High performance InGaIn LEDs on Si(111) substrates grown by MOCVD. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2010, vol. 43, pp. 354008 (8 pp). doi: 10.1088/0022-3727/43/35/354008
- GaN-on-Si. *Report of Yole Development*, 2014, www.yole.fr
- Briere M. A. GaN based power devices: Cost-effective revolutionary performance. *Power Electronics Europe*. 2008, no. 7, pp. 29–31.
- Baliga B. J. Gallium nitride devices for power electronic applications. *Semicond. Sci. Technol.* 2013, vol. 28, pp. 074011. doi: 10.1088/0268-1242/28/7/074011
- Power GaN. *Report of Yole Development*, 2010, www.yole.fr
- Hageman P. R., Haffouz S., Grzegorzczak A., Kirilyuk V., Larsen P. K. Growth of GaN epilayers on Si (111) substrates using multiple buffer layers. *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* 2001, vol. 693, pp. 13.20.11–3.20.6. doi: 10.1557/PROC-693-13.20.1
- Hsu Y. P., Chang Y. P., Chen W. S., Sheu J. K., Chu J. Y., Kuo C. T. Crack-free high-brightness InGaIn/GaN LEDs on Si(111) with initial AlGaIn buffer and two LT-Al interlayers. *J. Electrochem. Soc.* 2007, vol. 154, no. 3, pp. H191–H193. doi: 10.1149/1.2429040
- Dadgar A., Hempel T., Blasing J., Schulz O., Fritze S., Christen J., Krost A. Improving GaN-on-silicon properties for GaN device epitaxy. *Physica Status Solidi (c)*. 2011, vol. 8, no. 5, pp. 1503–1508. doi: 10.1002/pssc.201001137
- Zhu D., Humphreys C. J. Low-cost high-efficiency GaN LED on large-area Si substrate. *CS MANTECH Conf.* New Orleans (Louisiana, USA), 2013. pp. 269–272.
- Cao J., Li Sh., Fan G., Zhang Y., Zheng Y. Y., Huang J., Su J. The influence of the Al pre-deposition on the properties of AlN buffer layer and GaN layer grown on Si(111). *Journal of Crystal Growth*. 2010, vol. 312, no. 14, pp. 2044–2048.
- Arendarenko A. A., Ermoshin I. G., Oreshkin V. A., Svshnikov Yu. N., Tsyplenkov I. N., Garmash V. I., Egorkin V. I., Zemlyakov V. E., Litosh L. G. Nekotorye osobennosti vyrashchivaniya geterostruktur AlGaIn/GaN na podlozhkakh kremniya dlya SVCh tranzistorov [Some growth features for AlGaIn/GaN heterostructures on Si substrates for microwave transistors]. *Sbornik tezisev 9-i Vserossiiskoi konferentsii «Nitridy galliya, indiya, alyuminiya — struktury i pribory» [Abstracts of 9-th All-Russian conference «Gallium, indium and aluminium nitrides — structures and devices»]*. Moscow: MGU, 2013. pp. 78–79. (In Russ.)
- Stevenson R. Analysts are tipping tremendous growth for the compound semiconductor industry. *Compound Semiconductor*, 2012, vol. 18, no. 3, pp. 14–19.

Acknowledgements. The article was written based on an interdisciplinary scientific and practical seminar «Mathematical Modeling in Materials electronic nanostructures», held in the Institution of Russian Academy of Sciences Dorodnicyn Computing Centre of RAS.

Received December 25, 2014

УДК 621.315.592

НИТРИДНЫЕ НЕМТ ПРОТИВ АРСЕНИДНЫХ: ПОСЛЕДНЯЯ БИТВА?

© 2015 г. Ю. В. Федоров, С. В. Михайлович

Институт сверхвысокочастотной полупроводниковой электроники РАН,
Нагорный проезд, д. 7, стр. 5, Москва, 117105, Россия

Введение

Освоение терагерцового диапазона в последнее десятилетие является одним из самых приоритетных направлений развития полупроводниковых СВЧ-приборов. Частотные параметры полевых транзисторов с двумерным электронным газом (НЕМТ) на базе арсенидных гетероструктур (In,Ga,Al,P)As на подложках InP [1–3] и нитридных гетероструктур (In,Ga,Al)N на подложках Al₂O₃, SiC и Si (далее арсенидные и нитридные НЕМТ соответственно) в эти годы возрастали наиболее высокими темпами (рис. 1) [4]. Это стало возможным в результате развития технологии изготовления транзисторов:

– снижения сопротивления омических контактов путем освое-

ния технологии повторного выращивания высоколегированного контактного слоя n^+ -InGaAs или n^+ -GaN;

– создания как для арсенидных, так и для нитридных НЕМТ самосовмещенной технологии изготовления затворов и контактов, минимизирующих сопротивление канала транзистора;

– уменьшения длины затворов до 20 нм [4, 5].

Однако, как можно видеть из рис. 1, рост предельной частоты передачи тока f_T InP НЕМТ остановился на отметке $f_T = 688$ ГГц уже в 2011 г. [3], а нитридные НЕМТ после достижения $f_T = 454$ ГГц в 2013 г. [4] также, по-видимому, исчерпали возможности для развития.

Цель работы — анализ причин сложившейся ситуации и возмож-

Проведены расчетно-аналитические исследования предельных возможностей полевых транзисторов с двумерным электронным газом (НЕМТ) на арсенидных и нитридных гетероструктурах. Показано, что частотный предел таких приборов уже достигнут. Ограничения на предельные частоты имеют физический характер, связанный с конструкцией приборов, а не со свойствами полупроводников.

В частности, установлено, что определяющим параметром в данном случае является произведение $t_B C_{gd}$ (где t_B — расстояние от затвора до двумерного электронного газа; C_{gd} — общая емкость между затвором и стоком), технологические возможности минимизации которого, по-видимому, уже исчерпаны. Поэтому можно считать, что наиболее быстродействующими транзисторами на сегодняшний день являются рНЕМТ на подложках InP, а наиболее мощными — нитридные НЕМТ на SiC. Кроме того, показано, что пробивные напряжения и удельные мощностные параметры нитридных НЕМТ при заданной рабочей частоте определяются толщиной барьерного слоя гетероструктур, улучшаясь при его уменьшении. Это требует разработки эффективных нитридных наногетероструктур с t_B менее 10 нм. В этом плане вне конкуренции представляются гетероструктуры AlN/GaN благодаря высоким параметрам двумерного электронного газа и сравнительной простоте ростового процесса.

Ключевые слова: арсенидные и нитридные гетероструктуры, пробивное напряжение.

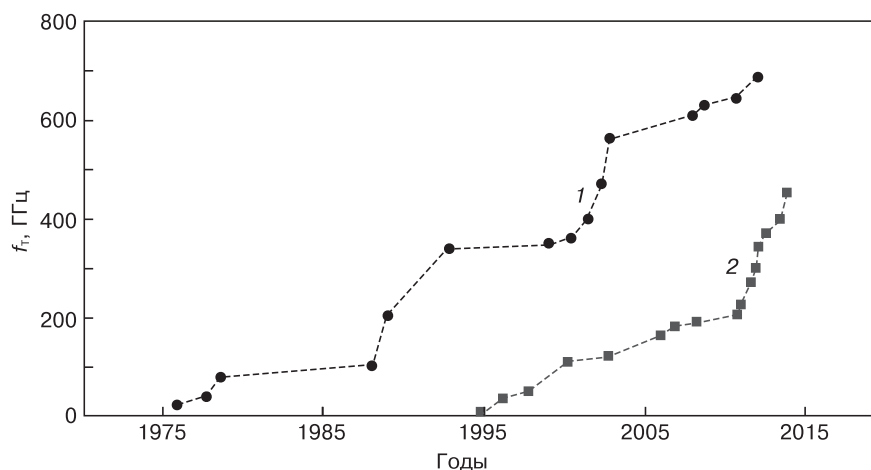


Рис. 1. Динамика повышения предельной частоты арсенидных и нитридных НЕМТ [4]:
1 — In_xGa_{1-x}As; 2 — GaN

Fig. 1. Dynamics of the limit frequency of arsenide and nitride HEMT [4]: (1) In_xGa_{1-x}As
and (2) GaN

Федоров Юрий Владимирович — главный конструктор, зам. директора; **Михайлович Сергей Викторович** — младший научный сотрудник, лаб. 102.

ностей дальнейшего повышения частот арсенидных и нитридных НЕМТ, а также сравнение их достижимых параметров.

Предельные СВЧ–параметры полевых транзисторов с двумерным электронным газом

Исследование предельных СВЧ–параметров НЕМТ удобно проводить на основе его эквивалентной схемы (рис. 2, [5]), на которой показаны внутренние и внешние паразитные элементы, определяющие его работу. Обычно считают, что предельная частота передачи по току f_T полевого транзистора определяется суммарным временем перезарядки τ_{tot} внутренних и внешних емкостей, т. е. $f_T = 1/2\pi\tau_{tot}$, где $\tau_{tot} = \tau_{int} + \tau_{ext} + \tau_{par}$ может быть представлено следующим образом [4]:

$$\tau_{tot} = \frac{C_{gsi} + C_{gdi}}{G_{mi}} + \frac{C_{gsxt} + C_{gdxt}}{G_{mi}} + (R_s + R_d) \left[C_{gd} + (C_{gs} + C_{gd}) \frac{G_d}{G_{mi}} \right], \quad (1)$$

где G_{mi} — внутренняя крутизна; G_d — выходная проводимость НЕМТ; $C_{gd} = C_{gdxt} + C_{gdi}$ — общая емкость затвор–сток; $C_{gs} = C_{gsxt} + C_{gsi}$ — общая емкость затвор–исток; R_s, R_d — сопротивления истока и стока соответственно.

Очевидно, что для повышения быстродействия НЕМТ необходимо уменьшать его паразитные емкости и сопротивления, а также повышать внутреннюю крутизну G_{mi} , на что и нацелено в последние годы развитие технологии как арсенидных, так и нитридных НЕМТ.

Используя формулу (1) после несложных преобразований с учетом известных соотношений

$$\frac{G_{mi}}{C_{gsi}} = \frac{V_{e_dr}}{L_G},$$

$$C_{gsi} = \epsilon_0 \epsilon_B W_G \frac{L_G}{t_B},$$

можно получить следующее выражение, описывающее зависимость произведения $f_T L_G$ (коэффициента качества НЕМТ) от аспектного отношения $K_{acp} = L_G/t_B$:

$$f_T L_G = \frac{V_{e_dr}}{2\pi} \left\{ 1 + (R_s + R_d) G_d + \frac{C_{gd} [1 + (R_s + R_d)(G_{mi} + G_d)] + C_{gsxt} (R_s + R_d) G_d}{\epsilon_0 \epsilon_B W_G \frac{L_G}{t_B}} \right\}^{-1}. \quad (2)$$

Здесь V_{e_dr} — эффективная дрейфовая скорость электронов под затвором транзистора; t_B — расстоя-

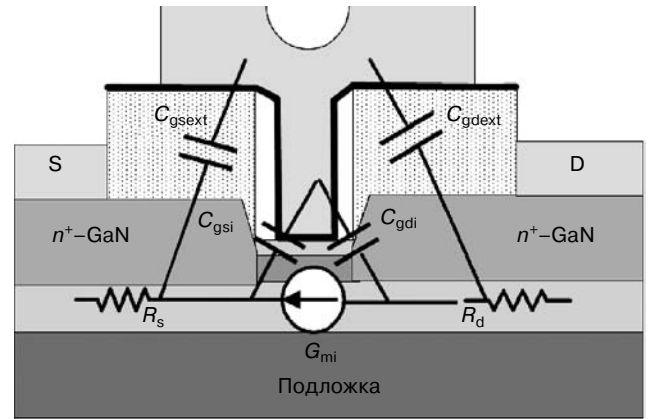


Рис. 2. Эквивалентная схема НЕМТ с паразитными элементами [5]

Fig. 2. Equivalent electrical diagram of HEMT with parasitic elements [5]

ние от затвора до двумерного электронного газа, примерно равное толщине барьерного слоя гетероструктуры; ϵ_B — диэлектрическая проницаемость барьера; W_G, L_G — ширина и длина затвора соответственно.

Экспериментальные зависимости произведения $f_T L_G$ от аспектного отношения L_G/t_B широко используют для сравнения качества транзисторов при отработке их технологии. Однако в явном виде выражение (2), по-видимому, впервые представлено в настоящей работе. Рассмотрим его применимость для анализа реальных приборов на основе имеющихся литературных данных. Для этой цели используем результаты работы [6], где на основании анализа многочисленных экспериментальных данных для нитридных НЕМТ получено следующее эмпирическое выражение:

$$f_T = \frac{19,8}{L_G + 5,1 t_B}, \quad (3)$$

где f_T выражены в ГГц, а L_G и t_B — в мкм. Умножив обе части на L_G , получим

$$f_T L_G = \frac{19,8}{1 + 5,1 \frac{t_B}{L_G}} [\text{ГГц} \cdot \text{мкм}]. \quad (4)$$

Кроме того, в работе [6] приведен график экспериментальной зависимости R_{ds} от L_G/t_B , которая была экстраполирована следующим эмпирическим выражением:

$$R_{ds} = 6,5 \cdot 10^{0,065 \frac{L_G}{t_B}} [\text{Ом} \cdot \text{мм}]. \quad (5)$$

Используем этот результат, подставив его вместо $G_d = 1/R_{ds}$ в формулу (2). Данная зависимость R_{ds} от L_G/t_B учитывает в явном виде короткоканальные эффекты при уменьшении длины затвора транзисторов. Кроме того, выразим сумму $(R_s + R_d)$ в формуле (2) через удельное сопротивление омических контактов $R_{к_уд}$ [Ом · мм] и удельное слоевое сопротивление гетероструктуры $R_{сл_уд}$ [Ом/□] в виде

$$R_s + R_d = 2R_{к_уд} + d_k R_{сл_уд} [\text{Ом} \cdot \text{мм}],$$

где d_k — сумма расстояний исток–затвор и затвор–сток транзистора в мм. Учтем также, переходя к удельным величинам емкостей в размерности

$$[\text{пФ/мм}], \text{ что в этом случае } C_{gsi_уд} = 8,85 \cdot 10^{-3} \epsilon_B \frac{L_G}{t_B}.$$

Окончательно получим выражение для $f_T L_G$ [ГГц $\times$ мкм] в следующем виде:

$$f_T L_G = 10^{-5} \frac{V_{e_dr}}{2\pi} \left[1 + a(x) + \frac{b(x)}{x} \right]^{-1}, [\text{ГГц} \cdot \text{мкм}], (6)$$

где $x = \frac{L_G}{t_B}$; $[V_{e_dr}]$ — см/с;

$$a(x) = \frac{2R_{к_уд} + d_k R_{сл_уд}}{6,5} \cdot 10^{-0,065x};$$

$$b(x) = \frac{C_{gd_уд} \left[1 + G_{mi_уд} (2R_{к_уд} + d_k R_{сл_уд}) + a(x) \right] + C_{gsext_уд} a(x)}{0,00885\epsilon_B}.$$

Считаем, что выражение (6) должно быть пригодно как для арсенидных, так и для нитридных НЕМТ. Это будет в дальнейшем проверено путем сравнения расчетных данных с экспериментальными результатами. При этом максимально будем использовать параметры транзисторов, приведенные в соответствующих работах или типичные для аналогичных приборов. Наборы использованных расчетных параметров приведены в таблице.

Нитридные НЕМТ

Для варианта 1 выбраны параметры расчетов на наилучшее соответствие с формулой (4), основанной на экстраполяции параметров большого количества нитридных НЕМТ [6]. Отклонение величин $f_T L_G$, полученных по формулам (4) и (6), не превышало 1 % в диапазоне L_G/t_B от 1 до 100. Как видно из данных таблицы, использованные в расчете величины $R_{к_уд} = 0,4 \text{ Ом} \cdot \text{мм}$, $R_{сл_уд} = 300 \text{ Ом}/\square$, $d_k = 2 \cdot 10^{-3} \text{ мм}$ и $G_{mi} = 400 \text{ мСм/мм}$ характерны для нитридных НЕМТ, изготовленных по «старой» технологии с вжигаемыми омическими контактами. Это неудивительно, поскольку на момент публикации работы [6] никакой другой технологии еще не существовало. Следует отметить, что «подгоночная» дрейфовая скорость электронов $V_{e_dr} = 1,216 \cdot 10^7 \text{ см/с}$ также близка к значению $1,24 \cdot 10^7 \text{ см/с}$, приведенному в референсной работе [6].

В варианте 2 использован набор параметров подгонки формулы (6) к более современным результатам для нитридных

НЕМТ, приведенным в работе [7]. В данном случае уже использовали современную самосовмещенную технологию с невжигаемыми омическими контактами с дорастиванием контактного n^+ -GaN-слоя в установке молекулярно–лучевой эпитаксии, характеризующуюся предельно малыми значениями контактного сопротивления (порядка $0,1 \text{ Ом} \cdot \text{мм}$), высокой внутренней крутизной $G_{mi_уд} = 1 \text{ См/мм}$ и малыми расстояниями исток–затвор и затвор–сток ($0,12 \text{ мкм}$). Как видно из рис. 3, результат расчетов по формуле (6) с такими параметрами хорошо совпадает с экспериментальными данными, приведенными в работе [7].

Отметим характерный ход зависимости $f_T L_G$ от аспектного отношения L_G/t_B , а именно: практически пропорциональное падение произведения $f_T L_G$ при низких значениях аспектного отношения. Это означает, что рост f_T при уменьшении L_G практически прекращается. Это отчетливо видно на рис. 4, где в явном виде построены зависимости f_T от L_G для рассмотренных выше вариантов 1 и 2. Эти зависимости $f_T(L_G)$ получены простым делением левой и правой частей формулы (6) на L_G . Дополнительно приведена аналогичная зависимость, полученная для параметров (см. таблицу, вариант 3) рекордного по частоте нитридного НЕМТ ($f_T = 454 \text{ ГГц}$, $f_{max} = 444 \text{ ГГц}$), подробно описанного и исследованного в работе [7]. На рис. 4 также приведены точки, полученные экспериментально. Как видно из рис. 4, ни одна из построенных зависимостей не достигает 1 ТГц , даже при уменьшении длины затвора до 10 нм . Интересно, что если даже «обнулить» в выражении (6) величины $R_{к_уд}$ и $R_{сл_уд}$ (технологический предел), то получим зависимость вида

$$f_T = 10^{-5} \frac{V_{e_dr}}{2\pi} \left(L_G + \frac{C_{gd_уд}}{0,00885\epsilon_B} t_B \right)^{-1},$$

которая при $L_G = 0$ дает конечную величину $f_{T_пред} = 10^{-5} \frac{V_{e_dr}}{2\pi} \frac{0,00885\epsilon_B}{t_B C_{gd_уд}}.$

Параметры НЕМТ, использованные в расчетах [HEMT parameters used in the calculation]

Параметр	Вариант 1 (Al,Ga)N	Вариант 2 (Al,GaN)	Вариант 3 (Al,Ga)N	Вариант 4 (In,Al,Ga)As
$R_{к_уд}$, Ом $\cdot$ мм	0,4	0,1	0,085	0,05
$R_{сл_уд}$, Ом/ $\square$	300	300	320	150
d_k , мкм	2	0,12	0,1	0,1
$G_{mi_уд}$, См/мм	0,4	1,0	1,25	2,5
$C_{gd_уд}$, пФ/мм	0,23	0,23	0,85	1,5
$C_{gsext_уд}$, пФ/мм	0,12	0,12	0,12	0,12
ϵ_B	10	10	10	13
V_{e_dr} , 10^7 см/с	1,216	1,5	2,8	4

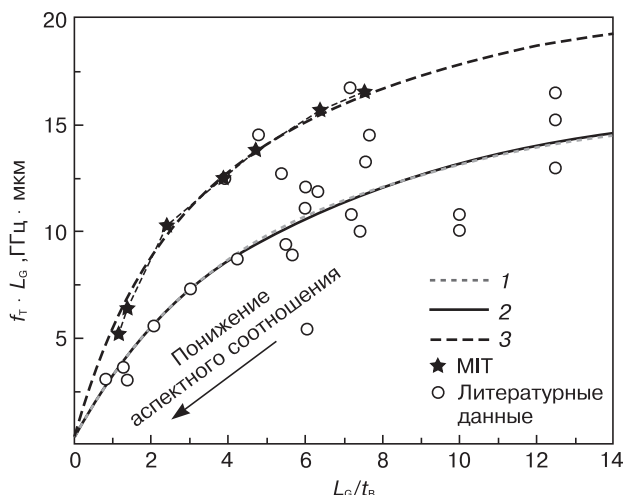


Рис. 3. Расчетные зависимости $f_T L_G$ от аспектного отношения L_G/t_B : 1 — эмпирическая зависимость [6]; 2 — вариант 1; 3 — вариант 2. Точки — данные работы [7]

Fig. 3. Theoretical $f_T L_G$ as a function of the L_G/t_B aspect ratio: (1) experimental function [6], (2) option 1 and (3) option 2. Points are data of earlier work [7]

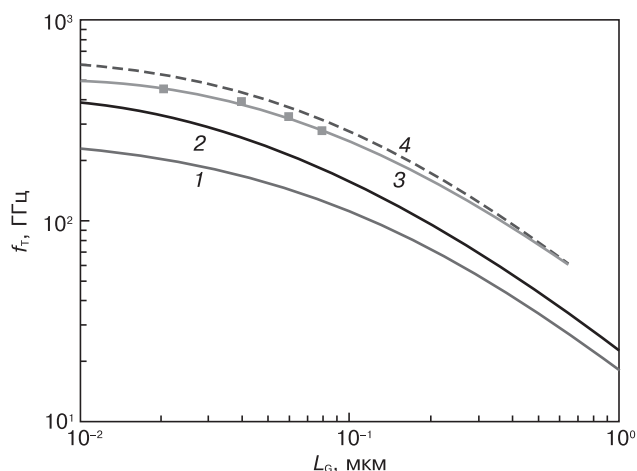


Рис. 4. Расчетные и экспериментальные (точки [7]) зависимости f_T от L_G : 1 — вариант 1; 2 — вариант 2; 3 — вариант 3; 4 — предельная кривая при $R_c = R_l = 0$

Fig. 4. Theoretical and experimental (points [7]) f_T as a function of L_G : (1) option 1, (2) option 2, (3) option 3 and (4) limit curve for $R_c = R_{cl} = 0$

Если возьмем толщину барьера рекордного НЕМТ [7] $t_B = 0,006$ мкм, а $C_{gd_уд} = 0,85$ пФ/мм из соответствующих подгоночных параметров (вариант 3), то получим значение $f_{T_пред} = 774$ ГГц, что значительно меньше 1 ТГц. Следует отметить, что «подгоночная» величина $C_{gd_уд}$ для варианта 3 кажется аномально высокой, поскольку значение $C_{gdi_уд}$ для моделей предельных по частоте НЕМТ после деэMBEDдинга (*de-embedding*), приведенные в работе [7], примерно в 7—8 раз ниже. Однако приведенные в работе [7] параметры моделей для НЕМТ с $L_G = 20$ нм не являются масштабируемыми, т. е. не позволяют получить измеренные значения f_T при больших величинах $L_G = 40, 60$ и 80 нм, а следовательно, вызывают определенные сомнения. «Уложить» все

эти точки на одну кривую удалось только при $C_{gd_уд} = 0,85$ пФ/мм. Причем все остальные параметры расчетов в точности соответствуют данным работы [7]. Поэтому значение $C_{gd_уд} = 0,85$ пФ/мм представляется более достоверным.

Таким образом, основным препятствием на пути повышения предельных частот НЕМТ на нитридных гетероструктурах более 1 ТГц является слишком большая величина $t_B C_{gd_уд}$. Возможность ее минимизации за счет уменьшения толщины барьерного слоя нитридных гетероструктур будет рассмотрена ниже.

Арсенидные НЕМТ на подложках InP

Для арсенидных НЕМТ и рНЕМТ на подложках InP, как и в случае нитридных НЕМТ, рост значения f_T с уменьшением длины затвора также замедляется. Для примера можно привести экспериментальные зависимости (рис. 5), представленные в работе [1], и результаты расчетов по формуле (6) (вариант 4). К сожалению, из-за отсутствия достаточного объема экспериментальных данных, в первую очередь это касается учета короткоканальных эффектов, точность проведенных расчетов невелика, но общий ход зависимости подтверждается. Очевидно, что для уменьшения короткоканальных эффектов необходимо приближение затвора к каналу транзистора, т. е. снижение толщины барьерного слоя. Однако в гетероструктурах с рекордными частотными параметрами рНЕМТ на подложках InP уже используется предельно тонкий барьерный слой InP толщиной всего 2 нм [3], который расположен непосредственно над каналом InAs толщиной 5—10 нм, обеспечивающим максимально возможную дрейфовую скорость электронов $(3—4) \cdot 10^7$ см/с в совокупности с очень

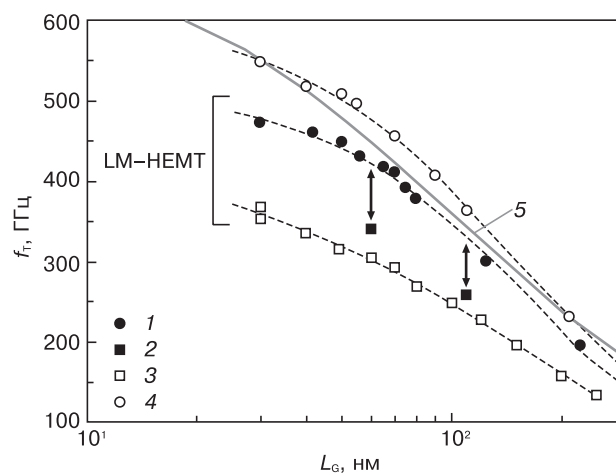


Рис. 5. Зависимости f_T от длины затвора G для арсенидных НЕМТ (1, 2) и рНЕМТ (4) на подложках InP [1]: 1 — $d = 13$ нм, $L_G = 50$ нм; 2 — $d = 13$ нм, $L_G = 190$ нм; 3 — $d = 13$ нм, $L_G = 180$ нм; 4 — $d = 12$ нм, $L_G = 80$ нм; 5 — расчет по формуле (6) для варианта 4 (см. таблицу)

Fig. 5. f_T as a function of gate length for (1 and 2) arsenide HEMT and (4) pHEMT on InP substrates [1]: (1) $d = 13$ nm, $L_G = 50$ nm; (2) $d = 13$ nm, $L_G = 190$ nm; (3) $d = 13$ nm, $L_G = 180$ nm; (4) $d = 12$ nm, $L_G = 80$ nm; (5) calculated using Eq. (6) for option 4 (see Table)

высокой подвижностью $\mu_e = 13000 \text{ В/(см}^2 \cdot \text{с)}$ [8, 9]. Это и обуславливает рекордные частотные параметры рНЕМТ с каналом InAs, которые на сегодняшний день являются непревзойденными. Хотя терагерцовый предел для значений f_T так и остается непреодоленным, по-видимому, из-за невозможности избавиться от задержек времени, связанных с перезарядкой C_{gd} .

Зависимость мощностных параметров нитридных НЕМТ от толщины барьерного слоя гетероструктур

Такая зависимость должна обязательно учитываться при выборе рабочего материала для изготовления приборов с заданными свойствами. Из-за отсутствия развитой теории нитридных НЕМТ использовали эмпирические данные, основанные на усреднении многочисленных экспериментальных результатов, представленных в работе [6].

Кроме уже использованных выше эмпирических зависимостей f_T от L_G и t_B , а также R_{ds} — от аспектного отношения $K_{кап} = L_G/t_B$, важным результатом работы [6] является график зависимости $U_{пр}$ от L_G/t_B , представленный на рис. 6, который был аппроксимирован выражением

$$U_{пр} = 7,3(K_{кап} - 2,5)^{0,52}, \text{ В.} \quad (7)$$

Как известно, максимальная выходная мощность, которая может быть получена для идеального транзистора, равна

$$P_{max} = \frac{I_{нас}(U_{пр} - U_{нас})}{8}, \quad (8)$$

где $I_{нас}$ — ток насыщения; $U_{пр}$ — напряжение пробоя; $U_{нас}$ — напряжение насыщения. При этом со-

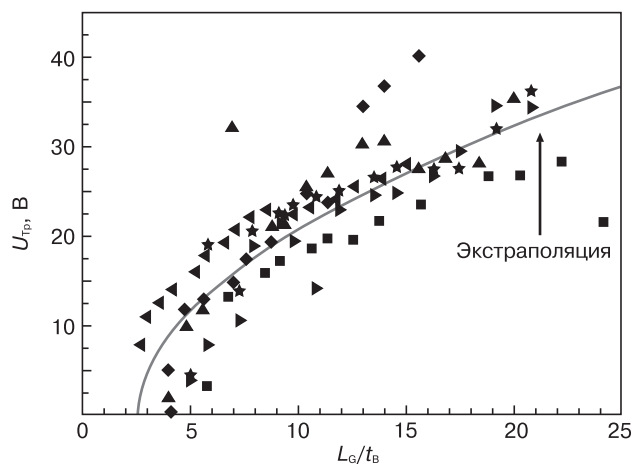


Рис. 6. Зависимость пробивного напряжения $U_{пр}$ нитридных НЕМТ от аспектного отношения L_G/t_B :

точки — экспериментальные значения работы [6]; линия — аппроксимация $U_{пр} = 7,3(K_{кап} - 2,5)^{0,52}$
 Fig. 6. Breakdown voltage U_{bd} of nitride HEMT as a function of the L_G/t_B aspect ratio: points are experimental data of earlier work [6]; solid curve is approximation for $U_{bd} = 7,3(K_{asp} - 2,5)^{0,52}$

противление, соответствующее нагрузочной прямой при максимальной мощности, можно описать соотношением

$$P_{н.макс} = \frac{U_{пр} - U_{нас}}{I_{нас}}. \quad (9)$$

Реальный транзистор имеет выходную проводимость G_d , которая учитывается при помощи добавления в модель идеального полевого транзистора сопротивления R_{ds} , параллельного нагрузке, причем $R_{ds} = 1/G_d$. Таким образом, сопротивление, определяющее нагрузочную прямую $R_{н.макс}$, одновременно должно удовлетворять соотношению

$$P_{н.макс} = \frac{R_{ds}R_n}{R_{ds} + R_n}, \quad (10)$$

где R_n — сопротивление нагрузки; R_{ds} — внутреннее сопротивление транзистора, определяющее его выходную проводимость. В этом случае полная мощность распределяется между мощностью, выделяемой в нагрузку («полезная»), и мощностью, которая отбирается сопротивлением R_{ds} («паразитная»). Путем несложных преобразований можно получить, что мощность, выделяемая в нагрузку, с учетом уравнений (7)–(9) описывается выражением

$$P_n = \frac{I_{нас}(U_{пр} - U_{нас})}{8} \left(1 - \frac{U_{пр} - U_{нас}}{I_{нас}R_{ds}} \right). \quad (11)$$

При этом оптимальное сопротивление нагрузки определяется как

$$P_{н.опт} = \frac{1}{\frac{I_{нас}}{U_{пр} - U_{нас}} - \frac{1}{R_{ds}}}. \quad (12)$$

При $R_{ds} \rightarrow \infty$ выражения (11) и (12) преобразуются в уравнения (8) и (9) соответственно.

Продифференцировав выражение (11) по R_{ds} , можно показать, что максимальная мощность в нагрузке достигается при $R_{ds} = \frac{2(U_{пр} - U_{нас})}{I_{нас}}$. В этом

случае $R_{н.опт} = R_{ds}$, а выражение (11) сводится к следующей простой формуле:

$$P_{н.макс} = \frac{I_{нас}^2 R_{ds}}{32}. \quad (13)$$

Если считать, что ток насыщения $I_{нас}$ пропорционален W_G , сопротивление R_{ds} обратно пропорционально W_G , а напряжения пробоя $U_{пр}$ и насыщения $U_{нас}$ не зависят от ширины затвора, то путем подстановки соответствующей аппроксимации (5) в формулу (13) получим следующее выражение для максимальной удельной мощности в нагрузке:

$$P_{н.макс.уд} = \frac{I_{нас.уд}^2}{32} \cdot 6,5 \cdot 10^{0,065K_{бар}}. \quad (14)$$

Очень важно отметить интересный результат, который мы получили: максимальная удельная мощность нитридных НЕМТ определяется не только максимальным удельным током, т. е. параметрами гетероструктуры, но и аспектным отношением L_G/t_B . Кроме того, поскольку при заданной частоте отсечки тока f_T одновременно задана и требуемая длина затвора L_G , то единственным способом повышения $P_{н.макс.уд}$ является уменьшение толщины гетероструктуры t_B , при условии сохранения $I_{нас.уд}$, что стимулирует разработку эффективных наногетероструктур (Al,Ga,In)N.

Этот результат наглядно показан на рис. 7, где построены одновременно возможные расчетные параметры транзисторов с использованием выражений (6) и (13) в координатах t_B-L_G . Как видно из рис. 7, для повышения предельных частот, удельных мощ-

ностей и пробивных напряжений нитридных НЕМТ следует применять более тонкие гетероструктуры, допустимая толщина барьера t_B которых резко уменьшается при повышении f_T . Так, если для W-диапазона (75—110 ГГц) можно использовать гетероструктуры с t_B от минимально возможных значений до 22 нм, то для достижения $f_T > 400$ ГГц необходимо использовать только гетероструктуры с $t_B < 6$ нм. Это хорошо согласуется с параметрами гетероструктур, представленными в современных работах [4, 5, 7] при получении предельных частотных параметров нитридных НЕМТ.

Высокие напряжение пробоя и f_T являются основными качествами транзистора при усилении мощности. В этом плане важной характеристикой является критерий Джонсона (*Johnson's figure of merit*), который определяется как произведение $f_T U_{пр}$. На рис. 8 представлена зависимость $U_{пр}$ от f_T для СВЧ-приборов на основе различных материалов. Из рис. 8 видно, что уменьшение толщины барьерного слоя гетероструктуры AlGaIn/GaN приводит к увеличению как f_T , так и напряжения пробоя. Из этого следует, что использование более «тонких» нитридных гетероструктур выгодно в плане получения высоких значений выходной мощности как на больших частотах (100 ГГц и более), так и на малых (1—10 ГГц). В этом отношении нитридные НЕМТ, как видно из рис. 8, не имеют себе равных, по крайней мере в диапазоне частот до ~400 ГГц при $t_B = 6$ нм и до 700 ГГц при $t_B = 3$ нм. Правда, получение таких высоких рабочих частот для нитридных НЕМТ в планарной геометрии, как было показано выше, невозможно.

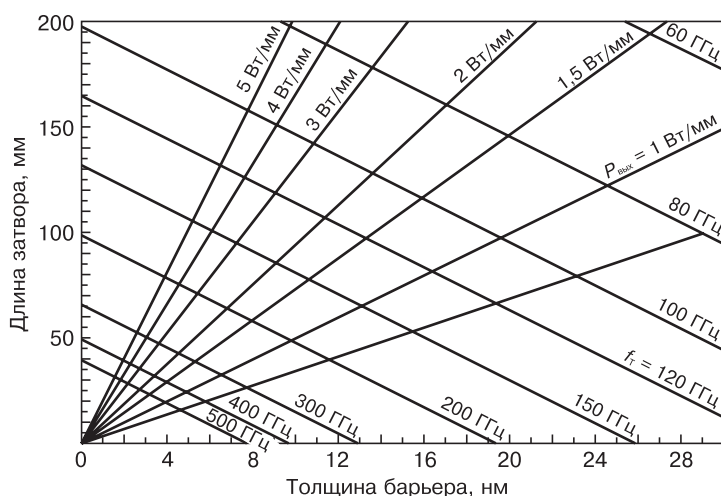


Рис. 7. Карта изолиний f_T и $P_{н.макс.уд}$ для нитридных НЕМТ при $I_{нас} = 1,6$ А/мм

Fig. 7. Map of the f_T and $P_{н.макс.уд}$ for HEMT at $I_{sat} = 1.6$ А/мм

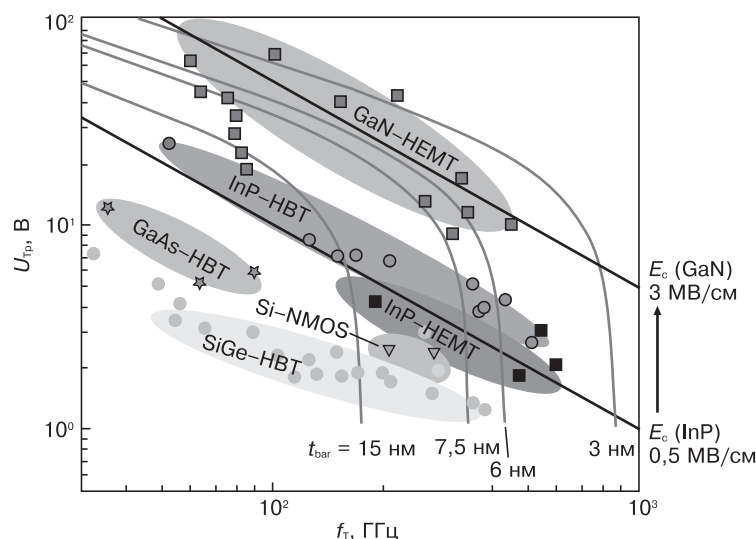


Рис. 8. Зависимость пробивного напряжения $U_{пр}$ от значения отсечки усиления по току f_T для СВЧ-приборов на основе различных материалов (серый цвет — расчет для нитридных НЕМТ при $t_B = 3, 6, 7,5$ и 15 нм)

Fig. 8. Breakdown voltage U_{bd} as a function of cutoff current amplification f_T for RF devices on the basis of different materials (gray curve is a calculation for nitride HEMT at $t_B = 3, 6, 7.5$ and 15 nm)

Заключение

Показано, что с большой уверенностью можно утверждать, что частотный предел НЕМТ на арсенидных и нитридных гетероструктурах уже достигнут. Ограничения на предельные частоты имеют физический характер, связанный с конструкцией приборов, а не со свойствами полупроводников. В частности, определяющим параметром в данном случае является произведение $t_B C_{gd}$, технологические возможности минимизации которого, по-видимому, уже исчерпаны. Установлено, что наиболее быстродействующими транзисторами являются r НЕМТ на подложках InP, а наиболее мощными — НЕМТ на нитридных гетероструктурах на SiC. Однако пробивные напряжения и удельные мощностные параметры НЕМТ на нитридных гетероструктурах при заданной рабочей частоте определяются толщиной барьерного слоя гетероструктур, улучшаясь при его уменьшении. Это требует

разработки эффективных нитридных наногетероструктур с t_B менее 10 нм. В этом плане вне конкуренции находятся гетероструктуры AlN/GaN благодаря малой толщине, высоким параметрам двумерного электронного газа и сравнительной простоте ростового процесса.

Библиографический список

1. Shinohara, K. Nano-gate transistor — world's fastest InP-HEMT / K. Shinohara, T. Matsui // J. National Institute of Information and Communications Technol. — 2004. — V. 51, N 1/2. — P. 95—102.
2. Waldron, N. A self-fligned InGaAs HEMT architecture for logic applications / N. Waldron, D.-H. Kim, J. A. del Alamo // IEEE Transactions on Electron Devices. — 2010. — V. 57, N 1. — P. 297—304.
3. Kim, D.-H. $f_T = 688$ GHz and $f_{max} = 800$ GHz in $L_g = 40$ nm $In_{0.7}Ga_{0.3}As$ MHEMTs with $gm_{max} > 2.7$ mS/ μm / D.-H. Kim, B. Brar, J. A. del Alamo // 2011. IEEE International Electron Devices Meeting. — 2011. — P. 13.6.1—13.6.4.
4. Lee, D. S. GaN high electron mobility transistors for sub-millimeter wave applications / D. S. Lee, Z. Liu, T. Palacios // Jap. J. Appl. Phys. — 2014. — V. 53, N 10. — P. 100212.
5. Huang, T. DC and RF performance of gate-last AlN/GaN MOSHEMTs on Si with regrown source/drain / T. Huang, Z. J. Liu, X. Zhu, J. Ma, X. Lu, K. M. Lau // IEEE Transactions on Electron Devices. — 2013. — V. 60, N 10. — P. 3019—3024.
6. Jessen, G. H. Short-channel effect limitations on high-frequency operation of AlGaIn/GaN HEMTs for T-gate devices / G. H. Jessen, R. C. Fitch, J. K. Gillespie, G. Via, A. Crespo, D. Langley, D. J. Denninghoff, M. Trejo, E. R. Heller // IEEE Transactions on Electron Devices. — 2007. — V. 54, N 10. — P. 2589—2597.
7. Shinohara, K. Scaling of GaN HEMTs and Schottky diodes for submillimeter-wave MMIC applications / K. Shinohara, D. C. Regan, Y. Tang, A. L. Corrión, D. F. Brown, J. C. Wong, J. F. Robinson, H. H. Fung, A. Schmitz, T. C. Oh, S. J. Kim, P. S. Chen, R. G. Nagele, A. D. Margomenos, M. Micovic // IEEE Transactions on Electron Devices. — 2013. — V. 60, N 10. — P. 2982—2996.
8. Egard, M. High transconductance self-aligned gate-last surface channel $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ MOSFET / M. Egard, L. Ohlsson, B. M. Borg, F. Lenrick, R. Wallenberg, L.-E. Wernersson, E. Lind // 2011. IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM). — 2011. — P. 13.2.1—13.2.4.
9. Kim, T.-W. ETB-QW InAs MOSFET with scaled body for improved electrostatics / T.-W. Kim, D.-H. Kim, D.-H. Koh, R. J. W. Hill, R. T. P. Lee, M. H. Wong, T. Cunningham, J. A. del Alamo, S. K. Banerjee, S. Oktyabrsky, A. Greene, Y. Ohsawa, Y. Trickett, G. Nakamura, Q. Li, K. M. Lau, C. Hobbs, P. D. Kirsch, R. Jammy // 2012 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM). — 2012. — P. 32.3.1—32.3.4.

Статья написана по материалам междисциплинарного научно-практического семинара «Математическое моделирование в материаловедении электронных наноструктур», проведенного в ВЦ РАН имени А. А. Дородницына

Статья поступила в редакцию 03 февраля 2015 г.

ISSN 1609–3577 Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2015, vol. 18, no. 1, pp. 16–22.

Nitride HEMTs VS Arsenides: the Ultimate Battle?

Yurii Vladimirovich Fedorov¹ — Chief Designer, R&D head; Sergei Viktorovich Mikhaylovich¹ — Junior Researcher

¹Institute of Ultra-High Frequency Semiconductor Electronics Russian Academy of Sciences, 7/5 Nagornyi proezd, Moscow 117105, Russia

Abstract. In this paper, we have studied the limit capabilities of nitride and arsenide HEMTs and shown that the frequency limit of these devices has already been reached. The nature of these frequency constraints arise from device design rather than from semiconductor properties. In particular we have established that the product tBC_d is the critical parameter which could not be minimized any further technologically. In summary it could be stated that nowadays InP pHEMTs offer the highest frequencies and GaN HEMTs on SiC substrate are the most powerful devices. In addition we have shown that the breakdown voltages and power density of nitride HEMTs at a given operating frequency are controlled by heterostructure barrier layer thickness, increasing with decrease of the latter. Therefore it is necessary to develop high efficiency nitride nanoheterostructures with t_B less than 10 nm. In this respect the AlN/GaN heterostructures are beyond comparison due to the good performance of 2D gas and relative simplicity of growth process.

Key words: arsenide and nitride heterostructures, breakdown voltage.

References

1. Shinohara K., Matsui T. Nano-gate transistor — world's fastest InP-HEMT. *J. National Institute of Information and Communications Technol.* 2004, vol. 51, no. 1/2, pp. 95—102.
2. Waldron N., Kim D.-H., del Alamo J. A. A self-fligned InGaAs HEMT architecture for logic applications. *IEEE Transactions on Electron Devices.* 2010, vol. 57, no. 1, pp. 297—304. DOI: 10.1109/TED.2009.2035031
3. Kim D.-H., Brar B., del Alamo J. A. $f_T = 688$ GHz and $f_{max} = 800$ GHz in $L_g = 40$ nm $In_{0.7}Ga_{0.3}As$ MHEMTs with $gm_{max} > 2.7$ mS/ μm . 2011. *IEEE International Electron Devices Meeting.* 2011, pp. 13.6.1—13.6.4. DOI: 10.1109/IEDM.2011.6131548
4. Lee D. S., Liu Z., Palacios T. GaN high electron mobility transistors for sub-millimeter wave applications. *Jap. J. Appl. Phys.* 2014, vol. 53, no. 10, p. 100212. doi:10.7567/JJAP.53.100212
5. Huang T., Liu Z. J., Zhu X., Ma J., Lu X., Lau K. M. DC and RF performance of gate-last AlN/GaN MOSHEMTs on Si with regrown source/drain. *IEEE Transactions on Electron Devices.* 2013, vol. 60, no. 10, pp. 3019—3024. DOI: 10.1109/TED.2013.2274656
6. Jessen G. H., Fitch R. C., Gillespie J. K., Via G., Crespo A., Langley D., Denninghoff D. J., Trejo M., Heller E. R. Short-channel effect limitations on high-frequency operation of AlGaIn/GaN HEMTs for T-gate devices. *IEEE Transactions on Electron Devices.* 2007, vol. 54, no. 10, pp. 2589—2597. DOI: 10.1109/TED.2007.904476
7. Shinohara K., Regan D. C., Tang Y., Corrión A. L., Brown D. F., Wong J. C., Robinson J. F., Fung H. H., Schmitz A., Oh T. C., Kim S. J., Chen P. S., Nagele R. G., Margomenos A. D., Micovi M. Scaling of GaN HEMTs and Schottky diodes for submillimeter-wave MMIC applications. *IEEE Transactions on Electron Devices.* 2013, vol. 60, no. 10, pp. 2982—2996. DOI: 10.1109/TED.2013.2268160
8. Egard M., Ohlsson L., Borg B. M., Lenrick F., Wallenberg R., Wernersson L.-E., Lind E. High transconductance self-aligned gate-last surface channel $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ MOSFET. 2011. *IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM).* 2011, pp. 13.2.1—13.2.4. DOI: 10.1109/IEDM.2011.6131544
9. Kim T.-W., Kim D.-H., Koh D.-H., Hill R. J. W., Lee R. T. P., Wong M. H., Cunningham T., del Alamo J. A., Banerjee S. K., Oktyabrsky S., Greene A., Ohsawa Y., Trickett Y., Nakamura G., Li Q., Lau K. M., Hobbs C., Kirsch P. D., Jammy R. ETB-QW InAs MOSFET with scaled body for improved electrostatics. 2012 *IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM).* 2012, p. 32.3.1—32.3.4. DOI: 10.1109/IEDM.2012.6479151

Acknowledgements. The article was written based on an interdisciplinary scientific and practical seminar «Mathematical Modeling in Materials electronic nanostructures», held in the Institution of Russian Academy of Sciences Dorodnicyn Computing Centre of RAS.

Received February 3, 2015

УДК 539.8:621.315.592

ВЛИЯНИЕ ВЫБОРА ПАРАМЕТРОВ ПЕРВОПРИНЦИПНЫХ РАСЧЕТОВ НА ПРЕДСКАЗАНИЯ ЭНЕРГЕТИКИ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В КРЕМНИИ

© 2014 г. М. Г. Ганченкова¹, И. А. Супрядкина², К. К. Абгарян³,
Д. И. Бажанов⁴, И. В. Мутигуллин³, В. А. Бородин²

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,
Каширское ш., д. 31, Москва, 115409, Россия

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»,
пл. акад. Курчатова, д. 1, Москва, 123182, Россия

³Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«Вычислительный центр РАН им. А. А. Дородницына»,
ул. Вавилова, д. 40, Москва, 119333, Россия

⁴Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,
Ленинские горы, д. 1, Москва, 119991, Россия

Точечные дефекты играют ключевую роль во многих видах технологии изготовления микроэлектронных приборов. Знание свойств точечных дефектов и особенностей их поведения при радиационном синтезе микроструктур для применения в устройствах на базе кремния позволяет оптимизировать условия их изготовления, повысить их качество и улучшить электронные свойства. Однако даже для простейших точечных дефектов в кремнии, таких как вакансии и межузельные атомы, недостаточно изучен целый ряд их свойств и особенностей поведения. Такое положение дел во многом обусловлено сложностью измерения параметров точечных дефектов. В этой ситуации значительную помощь в изучении свойств точечных дефектов оказывает применение численного моделирования, особенно с использованием квантово-механических методов на основе подхода теории функционала плотности.

На примере нескольких простейших точечных дефектов в кремнии проведено систематическое исследование влияния различных приближений, используемых при первопринципном квантово-механическом моделировании, на энергетические параметры дефектов. Продemonстрировано, что наиболее существенное воздействие на предсказываемые энергии образования рассмотренных дефектов оказывает выбор вида обменно-корреляционного функционала. В этом случае вариация других рассмотренных приближений оказывает на результаты моделирования второстепенное влияние.

Ключевые слова: кремний, точечные дефекты, моделирование.

Введение

Изучение собственных точечных дефектов в кремнии, их параметров и особенностей их взаимодействия представляет важную область теоретических и экспериментальных исследований на протяжении уже многих десятилетий. Это связано с ключевой ролью точечных дефектов во многих технологиях изготовления микроэлектронных приборов. Знание свойств точечных дефектов и особенностей их поведения при радиационном синтезе микроструктур позволяет оптимизировать условия изготовления устройств на базе кремния, повысить их качество и улучшить электронные свойства [1].

Даже для простейших точечных дефектов в кремнии, таких как вакансии и межузельные атомы, совершенно недостаточно изучен целый ряд их свойств и особенностей поведения. В немалой степени такое положение дел связано со сложностью измерения тех

или иных параметров точечных дефектов, даже когда это принципиально возможно. Не меньше проблем для изучения точечных дефектов создают и сопутствующие факторы, характерные для полупроводников. К примеру, параметры дефектов в собственном кремнии могут сильно отличаться от тех же параметров в кремнии *n*- или *p*-типа проводимости.

В этой ситуации значительную помощь в изучении свойств точечных дефектов оказывает применение численного моделирования, особенно с использованием квантово-механических (первопринципных) методов на основе подхода теории функционала плотности (DFT) [2]. С помощью этого метода можно оценить не только энергии образования точечных дефектов, но и их воздействие на электронные свойства материала. Полученные из первопринципных расчетов оценки выгодности различных конфигураций точечных дефектов и барьеров

Ганченкова Мария Герасимовна¹ — кандидат физ.-мат. наук, старший научный сотрудник, e-mail: MGGanchenkova@mephi.ru; **Супрядкина Ирина Анатольевна**² — e-mail: irinasupriadkina@mail.ru; **Абгарян Каринэ Карленовна**³ — кандидат физ.-мат. наук, зав. сектором, e-mail: kristal83@mail.ru; **Бажанов Дмитрий Игоревич**⁴ — кандидат физ.-мат. наук, e-mail: dmibaz@sols347–5.phys.msu.ru; **Мутигуллин Илья Васильевич**³ — старший научный сотрудник, кандидат физ.-мат. наук, e-mail: mutigul@ccas.ru; **Бородин Владимир Алексеевич**² — доктор физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник.

их миграции позволяют определить надежность предсказаний полуэмпирических потенциалов, используемых для моделирования динамики дефектов методом классической молекулярной динамики.

К сожалению, даже в первопринципных методах моделирования используют целый ряд приближений и упрощающих предположений. Сама теория функционала электронной плотности представляет собой лишь приближенное решение многочастичного уравнения Шредингера. Дополнительные погрешности вносятся в результате использования приближенных выражений для одного из основных параметров теории — так называемого обменно–корреляционного функционала. В настоящее время наиболее широко используют два приближения: локальной электронной плотности (**LDA**) [2] и обобщенных градиентов (**GGA**) [3]. Еще одна неоднозначность связана со способом описания взаимодействия валентных электронов материала с сильно связанными электронами ионов. Для этого также применяют два основных подхода, а именно: метод присоединенных проективных волн (**PAW**) [4] или использование псевдопотенциалов (среди которых наибольшее распространение получили так называемые ультра–мягкие (**US**) псевдопотенциалы [5]). Кроме указанных выше приближений, на точность расчета могут влиять размеры используемых для моделирования кристаллитов, выбор параметров численного решения уравнений и пр. Однако если последние ошибки можно (и нужно) минимизировать адекватным подбором параметров расчета (см., например, работы [6, 7]), то погрешности, связанные с выбором обменно–корреляционных функционалов или с описанием взаимодействия валентных электронов с внутренними оболочками ионов, неустранимы в принципе.

Как свидетельствует практика использования различных приближений теории функционала плотности, результаты расчета энергий точечных дефектов часто оказываются зависящими от выбора параметров моделирования. Для оценки общей точности применения метода DFT в каждой конкретной ситуации полезно сопоставление расчетных параметров точечных дефектов, полученных с использованием различных приближений. К сожалению, в связи со значительной трудоемкостью вычислений на основе первопринципных методов подобные систематические исследования влияния используемых приближений на предсказываемые параметры точечных дефектов сравнительно редки.

Цель работы — исследование влияния различных приближений, используемых при первопринципном квантово–механическом моделировании, на энергетические параметры дефектов для нескольких простейших точечных дефектов в кремнии. Варьируемым параметром является прежде всего вид обменно–корреляционного приближения. В ряде расчетов варьируются также способы описания взаимодействия валентных электронов с электронными

оболочками ионов и размеры расчетных ячеек. Для демонстрации практического использования данных, полученных с помощью моделирования, проведено сравнение результатов расчетов для межузельного атома в кремнии на основе первопринципных методов и на основе модельных полуэмпирических потенциалов.

Методология моделирования

Расчеты в рамках теории функционала электронной плотности проводили с помощью программного комплекса Vienna *Ab-initio* Simulation Package (VASP). Для расчетов использовали приближения GGA и LDA для обменно–корреляционного потенциала. Взаимодействие валентных электронов с сильно связанными электронами атомных остовов описывали с помощью US–псевдопотенциалов и метода PAW. Энергию обрезания в разложении волновых функций по плоским волнам выбирали не ниже 300 эВ. При расчетах использовали k –сетку в зоне Бриллюэна, построенную по методу Монкхроста–Пака. Размерность сетки зависела от размера расчетной ячейки, изменяясь от $8 \times 8 \times 8$ точек для 8–атомных ячеек до $2 \times 2 \times 2$ точек в ячейке с 216 и более атомами. Выбранный набор расчетных параметров является достаточным для обеспечения сходимости результатов расчетов. Численную релаксацию атомных конфигураций с дефектами проводили до тех пор, пока максимальная сила, действующая на атом, не падала ниже 0,01 эВ/нм.

При моделировании точечных дефектов использовали кубические периодические ячейки, содержащие 8, 64 или 216 атомов кремния. Для моделирования межузельных атомов использовали ячейки размером до 576 атомов. Исходные конфигурации вакансий и дивакансий в кристаллической решетке кремния создавали путем удаления нужного числа атомов из узлов решетки, а исходные конфигурации межузельных атомов — путем размещения дополнительного атома кремния так, чтобы получалась приблизительно требуемая конфигурация.

Для оценки влияния размера расчетной ячейки, содержащей 8 и 64 атома, на степень упругой релаксации допускалась подстройка размера ячейки при минимизации полной энергии. Для больших ячеек размер оставался фиксированным, поскольку для них релаксация объема за счет внедрения точечных дефектов пренебрежимо мала.

Энергию образования E_D^f для точечного дефекта произвольного типа D ($D = V$ для вакансии, $2V$ для дивакансии или I для межузельного атома) рассчитывали по формуле

$$E_D^f = E_D^{\text{tot}} - E_0^{\text{tot}} + (n_V - n_I)E_c,$$

где E_D^{tot} , E_0^{tot} — полные энергии кристаллических ячеек с дефектом и без него соответственно;

$E_c = E_0^{\text{tot}}/N$ — энергия, приходящаяся на один атом идеальной решетки; N — число узлов решетки в расчетных ячейках; n_v, n_I — количество незанятых узлов и внедренных атомов в решетке с дефектом.

Энергию связи двух вакансий в дивакансии определяли либо по формуле

$$E_{2V}^b = 2E_V^f - E_{2V}^f,$$

либо (в ячейках с подстраиваемым размером) как разницу полных энергий ячеек, содержащих вакансии на максимально возможном расстоянии в ячейке E_{V+V}^{tot} и на расстоянии первых соседей:

$$E_{2V}^b = E_{V+V}^f - E_{2V}^f.$$

В расчетах энергетики межузельных атомов с помощью полуэмпирических потенциалов применяли широко используемые для кремния потенциалы Стиллинжера—Вебера (SW) [8], Терсоффа [9], EDIP [10] и MEAM [11]. Во всех расчетах рассматривали ячейку, содержащую 2400 атомов кремния, что позволяло исключить влияние периодических граничных условий на результаты расчетов.

Результаты и их обсуждение

Идеальная решетка кремния. Прежде всего, были оценены равновесные значения параметра кристаллической решетки a и энергии связи на один атом решетки E_c для идеального кремния. Полученные значения представлены в табл. 1. Как видно из данных табл. 1, и параметр решетки, и энергия связи заметно различаются для разных обменно-корреляционных приближений (GGA или LDA), но в рамках каждого из них слабочувствительны к конкретному способу описания потенциала иона (US или PAW) и размеру ячейки. Параметры решетки в обоих случаях на ~0,003 нм отличаются от экспериментального значения (0,5431 нм), причем GGA дает слегка завышенные, а LDA — заниженные значения.

Вакансии. При оценке энергии образования вакансии необходимо иметь в виду, что релаксация атомов, окружающих вакансию в кремнии, может происходить несимметрично. Поэтому расчет энергии образования вакансии проводили для набора исходных конфигураций вакансии, где ближайшие к вакансии атомы кремния были изначально слегка смещены с идеальных позиций в решетке так, чтобы соответствовать одной из точечных групп симметрии: T_d , D_{2d} и C_{2v} . Согласно результатам численной минимизации энергии конфигураций, происходит релаксация ближайших

соседей вакансии, которые смещаются в направлении вакантного узла решетки, что согласуется с выводами, которые были сделаны на основе данных предшествующих расчетов [12]. При этом релаксация системы и исходная симметрия вакансионного окружения сохранялись. Общий характер релаксации для GGA и LDA качественно подобен, однако степень релаксации заметно больше для случая LDA.

В табл. 2 собраны расчетные значения энергии образования изученных конфигураций вакансии. Различия в энергиях образования вакансий с разными типами симметрии относительно невелики, а сами энергии близки к экспериментальным значениям (например $E_V^f = 3,6$ эВ [13]). Для обоих обменно-корреляционных функционалов симме-

Таблица 1

Параметры решетки a и энергии связи кристалла на атом решетки E_c для кристаллитов кремния размером 8 и 64 атома в рамках различных расчетных приближений

[Table 1. Lattice parameters a and crystal bond energies per lattice atom E_c for silicon grains sized 8 and 64 atoms for different calculation approximations]

Приближение	a , нм		E_c , эВ	
	8 ат.	64 ат.	8 ат.	64 ат.
GGA—US	0,5456	0,5455	–5,433	–5,434
GGA—PAW	0,5468	0,5468	–5,431	–5,432
LDA—US	0,5390	0,5390	–5,977	–5,977
LDA—PAW	0,5401	0,5404	–5,961	–5,961

Таблица 2

Энергия образования вакансии (в эВ) в расчетной ячейке, содержащей 216 атомов кремния, для различных типов релаксационной симметрии

[Table 2. Vacancy formation energy (eV) in a 216-atom silicon cell for different types of relaxation symmetry]

Приближение	Число атомов в ячейке	Симметрия			Литературный источник
		T_d	D_{2d}	C_{2v}	
GGA—US	216	3,84	3,67	3,67	—
LDA—US	216	3,70	3,70	3,51	—
GGA	216	3,17*	Нет св.	—	[15]
GGA	256	Нет св.	3,17	—	[6]
GGA	1000	Нет св.	3,62	—	[16]
LDA	64	Нет св.	3,53	—	[17]
LDA	216	3,56*	Нет св.	—	[15]
LDA	256	4,13	3,45	—	[7]
LDA	1000	—	3,52	—	[16]

* В работе информация о симметрии не приведена.

тричная релаксация вакансии (по типу T_d) не самая выгодная с энергетической точки зрения. Для наиболее энергетически выгодного режима релаксации расчеты LDA и GGA дают качественно различные результаты: в первом случае наименьшую энергию образования имеет вакансия с симметрией C_{2v} , а во втором — энергии образования вакансий с симметрией D_{2d} и C_{2v} практически идентичны. Интересно отметить, что экспериментальные данные [14] обычно интерпретируются в пользу симметрии D_{2d} . Но в действительности как симметрия D_{2d} , так и C_{2v} качественно не противоречат экспериментальным наблюдениям. Однако количественный анализ соответствия C_{2v} эксперименту не проводили.

Как видно из табл. 2, результаты моделирования хорошо согласуются с данными других расчетов. Следует, однако, отметить отсутствие в предшествующих работах указаний на энергетическую конкурентоспособность (а для LDA даже предпочтительность) конфигурации с симметрией C_{2v} . Скорее всего возможность такого рода симметрии для нейтральной вакансии ранее не проверяли.

Одним из аспектов работы была оценка влияния возможной релаксации объема ячейки на энергию образования вакансии (табл. 3). Как и можно было ожидать, исходя из наблюдаемого характера релаксации атомов в направлении центра вакансии, во всех рассмотренных случаях выигрыш в энергии образования вакансии сопровождается уменьшением размера расчетной ячейки. Для ячейки из 8 атомов изменения значительные, т. е. она слишком мала для оценки энергии даже единичной вакансии. Но релаксация 64-атомной ячейки почти не влияет на результаты.

Дивакансии являются одним из основных дефектов, наблюдаемых при облучении образцов кремния быстрыми частицами (ионами, нейтронами и электронами) [18, 19]. В отличие от вакансий, присутствие дивакансий в кремнии легко выявляется экспериментально. Целый ряд работ был посвящен исследованию дивакансий, в том числе и их энергетических параметров [20–22].

В табл. 4 представлены результаты расчетов энергии дивакансии в сравнении с результатами ряда предшествующих работ. Имеет место разумное согласие полученных значений энергии образования дивакансии с предыдущими оценками. Сравнение расчетной энергии образования дивакансий с экспериментом невозможно, поскольку измерить эту энергию крайне сложно. Однако такое сравнение возможно для энергии связи вакансий в дивакансии, которая допускает экспериментальную оценку. Наиболее надежно установлено нижнее ограничение на величину энергии связи — 1,6 эВ [18]. В работе [23] приведена более определенная оценка: $E_{2V}^b = 1,71$ эВ. Как наши результаты моделирования, так и предыдущие оценки разумно согласуются с этими экспериментальными данными.

Аналогично был проведен анализ влияния подстройки размера расчетной ячейки на энергетические параметры дивакансии (табл. 5). Релаксация ячейки уменьшает параметр кристаллической решетки сильнее, чем в случае вакансии, но все же изменение параметра решетки не превышает 0,005 нм. Выигрыш в энергии образования дивакансии также относительно невелик по сравнению с результатом на ячейке из 216 атомов. Это указывает на то, что упругие напряжения от дивакансии на ячейке из 64 атомов сравнительно мало искажают результат.

Межузельные атомы. Для межузельных атомов прямые экспериментальные оценки энергетических параметров невозможны, так что информация о межузельных атомах в кремнии может быть получена путем моделирования. Согласно существующим представлениям, в кремнии могут реализоваться четыре стабильные конфигурации межузельных атомов, различающиеся энергиями образования. К ним

Таблица 3

Расчетные значения периода решетки ячейки с вакансией a_V и энергии образования вакансии E_V^f
[Table 3. Calculated lattice parameter of a cell with a vacancy a_V and vacancy formation energy E_V^f]

Приближение	a^* , нм	a_V , нм		E_V^f , эВ	
		8 ат.	64 ат.	8 ат.	64 ат.
GGA—US	0,5455	0,5295	0,5439	2,889	3,633
GGA—PAW	0,5468	0,5302	0,5449	2,877	3,620
LDA—US	0,5390	0,5116	0,5362	2,802	3,524
LDA—PAW	0,5404	0,5173	0,5375	2,795	3,505

* Для сравнения приведены значения параметра a идеальной решетки.

Таблица 4

Энергии образования E_{2V}^f и связи E_{2V}^b дивакансии в атомной ячейке, содержащей 216 атомов кремния, в сопоставлении с аналогичными данными из других работ

[Table 4. Formation E_{2V}^f and bond E_{2V}^b energies of a divacancy in a 216-atom silicon cell as compared with respective data of other works]

Приближение	Количество атомов в ячейке	E_{2V}^f , эВ	E_{2V}^b , эВ	Литературный источник
GGA—US	216	5,57	1,80	—
LDA—US	216	5,60	1,42	—
LDA	64	5,65	1,19	[21]
DFTB*	64	5,68	1,68	[20]
DFTB*	512	5,80	1,80	[22]

* DFTB — теория функционала плотности в приближении сильной связи.

Таблица 5

Период решетки кремния с дивакансией a_{2V} , энергия образования E_{2V}^f и связи E_{2V}^b дивакансии в 64–атомной расчетной ячейке с подстраиваемым объемом

[Table 5. Silicon lattice parameter for a cell with a divacancy a_{2V} and formation E_{2V}^f and bond E_{2V}^b energies of a divacancy in a calculated 64–atom cell with adjustable volume]

Приближе- ние	a^* , нм	a_{2V} , нм	E_{2V}^f , эВ	E_{2V}^b , эВ
GGA—US	0,5455	0,5416	5,29	2,01
GGA—PAW	0,5468	0,5426	5,28	1,99
LDA—US	0,5390	0,5334	5,12	1,91
LDA—PAW	0,5404	0,5346	5,10	1,88
* Для сравнения приведены значения параметра a идеальной решетки.				

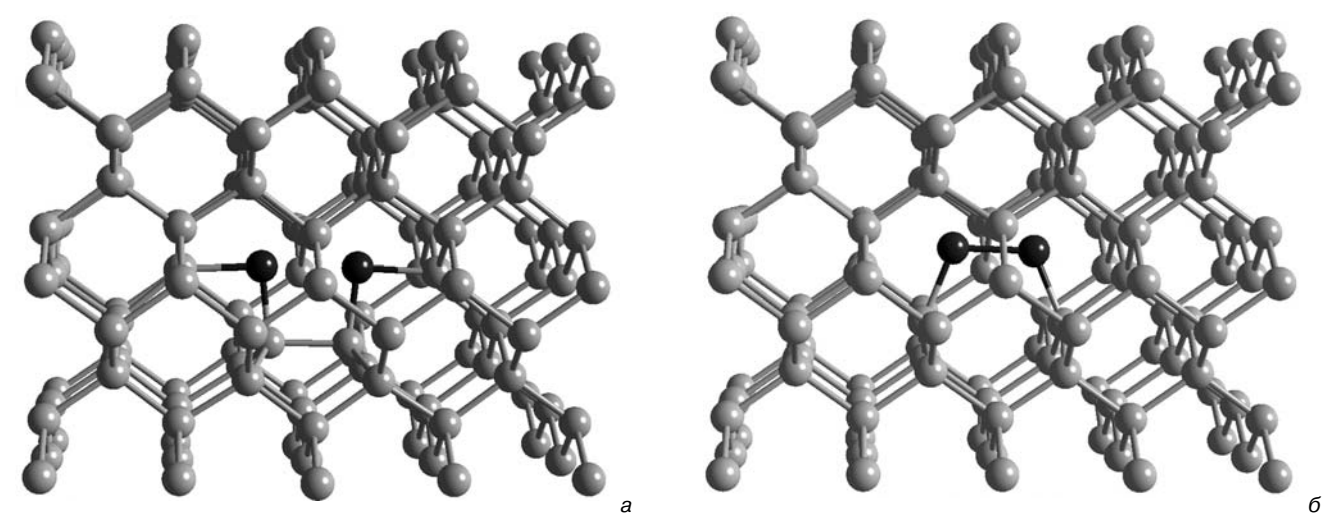
относятся две истинно межузельные конфигурации, в которых атом кремния расположен в тетраэдрическом (Т) и гексагональном (Н) межузельных положениях, и два варианта гантельной конфигурации, образованной парой атомов кремния, ориентированной вдоль направления $\langle 110 \rangle$. Эти варианты часто называют расщепленной (Х) и расширенной расщепленной (ЕХ) конфигурациями (рисунок).

В табл. 6 представлены результаты расчета энергии образования межузельных атомов разного типа в сравнении с данными, полученными некоторыми другими авторами на основе первопринципных методов расчета, а также с расчетами для тех же конфигураций, но выполненных с помощью ряда широко используемых полуэмпирических межатомных потенциалов. Практически все данные, полученные в приближении GGA, предсказывают энергию обра-

зования межузельного атома в Х–конфигурации на уровне 3,7—3,8 эВ, тогда как для приближения LDA более характерны значения на уровне 3,3—3,4 эВ. Для обоих приближений очень близки предсказываемые значения для энергий межузельных атомов в Х– и Н–конфигурациях. При использовании достаточно больших расчетных ячеек предпочтительней все же гантельная конфигурация, но энергетический выигрыш составляет всего несколько сотых эВ. Энергия межузельного атома в тетраэдрической позиции на 0,2—0,3 эВ выше, чем у расщепленной гантели. Оценки энергии образования межузельных атомов вида EX свидетельствуют, что они заметно менее энергетически выгодны, чем даже тетраэдрические. Аналогичный качественный результат для LDA–приближения упоминается в работе [24], хотя конкретных цифр авторы не приводят.

Результаты расчетов влияния подстройки размера 64–атомной расчетной ячейки на энергию образования межузельного атома представлены в табл. 7 для наиболее энергетически выгодной гантельной конфигурации. Согласно общей тенденции, рассчитанная в приближении GGA энергия несколько выше, чем предсказанная в приближении LDA. В противоположность дефектам вакансионного типа, внедрение атома в решетку кремния приводит к ее локальному расширению и увеличению среднего параметра решетки. Однако выигрыш в энергии образования межузельного атома составляет менее 0,1 эВ по сравнению с данными, представленными в табл. 6. Иными словами, расщепленная конфигурация межузельного атома относительно слабо искажает решетку кремния.

Продemonстрируем применение полученных результатов для оценки полуэмпирических межатомных потенциалов для моделирования динамического поведения межузельных атомов в кремнии. Как видно из данных табл. 6, два самых распростра-



Гантельные конфигурации межузельного атома в кристалле кремния:

a — Х; b — EX.
В обоих случаях межузельная пара (●●) ориентирована вдоль направления $\langle 110 \rangle$
Dumb bell configurations of an interstitial atom in silicon crystal:
(a) X and (b) EX. In both cases the interstitial pair (●●) is oriented along the $\langle 110 \rangle$ direction

Таблица 6

Заключение

Расчетные энергии образования E_f^f (в эВ) для межузельных атомов различного типа в кремнии[Table 6. Theoretical formation energies E_f^f (eV) of different types of interstitial atoms in silicon]

Приближение или потенциал	Коли- чество атомов в ячейке	Тип межузельного атома				Литера- турный источник
		X	H	T	EX	
Первопринципные методы						
GGA	300	3,73	3,76	3,93	4,37	—
	64	3,70	3,80	5,10	—	[24]
	64	3,84	3,80	4,07	—	[25]
	128	3,84	3,80	4,07	—	[26]
	216	3,31	3,31	—	—	[15]
	216	3,67	3,77	4,09	—	[27]
	256	3,73	3,79	4,06	—	[28]
LDA	128	3,31	—	—	—	[26]
	128	3,31	3,31	3,43	—	[25]
	216	2,88	2,87	—	—	[15]
	216	3,37	3,42	3,56	—	[27]
Полуэмпирические потенциалы						
SW	2400	4,40	4,41	4,92	3,66	—
Tersoff	2400	4,35	4,63	3,69	3,84	—
EDIP	2400	3,38	4,05	4,16	3,5	—
MEAM	2400	3,34	He уст.	3,655	4,14	—

Таблица 7

Расчетные значения периода решетки армат и энергии образования E_f^f для гантельной конфигурации типа X в подстраиваемой 64-атомной ячейке[Table 7. Theoretical lattice parameters a_{PMA} and formation energies E_f^f for an X-type dumb bell configuration in an adjustable 64-atom cell]

Приближение	a_f , нм	E_f^f , эВ
GGA—PAW	0,5491	3,67
LDA—PAW	0,5424	3,31

ненных потенциала для кремния (SW и Терсофф) для указанной цели практически неприменимы, поскольку предсказывают неверное основное состояние межузельного атома. Потенциалы EDIP и MEAM верно определяют конфигурацию с наименьшей энергией, но неверно воспроизводят энергетическую линейку метастабильных конфигураций. К примеру, ни тот ни другой не воспроизводят близость значений энергий для конфигураций X и H. Кроме того, при использовании EDIP неоправданное предпочтение отдается конфигурации EX по сравнению с H. Это означает, что результаты молекулярно-динамического моделирования диффузии межузельных атомов в кремнии следует воспринимать с осторожностью.

В результате сравнительного анализа влияния различных расчетных приближений первопринципного моделирования на энергии образования точечных дефектов в кремнии продемонстрировано, что наиболее существенное воздействие на получаемые результаты оказывает выбор обменно-корреляционного функционала. Выбор модели описания взаимодействия валентных электронов с электронными оболочками ионов в рамках одного обменно-корреляционного функционала сказывается на предсказаниях несущественно. Выбор фиксированного или подстраиваемого объема расчетной ячейки сильно влияет на предсказания только в малых ячейках, а уже в ячейке, содержащей 64 атома кремния, влияние этого фактора становится второстепенным.

Продemonстрирована общая для всех рассмотренных дефектов тенденция, согласно которой обменно-корреляционные функционалы типа GGA предсказывают более высокие энергии образования точечных дефектов в кремнии, чем функционалы типа LDA.

На примере межузельных атомов в кремнии продемонстрировано, как результаты расчетов на основе первопринципных методов могут быть использованы для оценки надежности предсказаний классических методов атомного моделирования.

Библиографический список

1. Pelaz, L. Front-end process modeling in silicon / L. Pelaz, L. A. Marques, M. Aboy, P. López, I. Santos // Eur. Phys. J. B. – 2009. – V. 72. – P. 323–359.
2. Kohn, W. Self-consistent equations including exchange and correlation effects / W. Kohn, L. J. Sham // Phys. Rev. – 1965. – V. 140. – P. A1133–A1138.
3. Perdew, J. P. Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation. / J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, M. R. Pederson, D. J. Singh, C. Fiolhais // Phys. Rev. B. – 1992. – V. 46. – P. 6671–6687.
4. Kresse, G. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method / G. Kresse, D. Joubert // Phys. Rev. B. – 1999. – V. 59. – P. 1758–1775.
5. Vanderbilt, D. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism / D. Vanderbilt // Phys. Rev. B. – 1990. – V. 41. – P. 7892–7895.
6. Probert, M. I. J. Improving the convergence of defect calculations in supercells: An ab initio study of the neutral silicon vacancy / M. I. J. Probert, M. C. Payne // Phys. Rev. B. – 2003. – V. 67. – P. 075204.
7. Corsetti, F. The silicon vacancy: insights from large-scale electronic structure calculations and maximally-localized Wannier functions / F. Corsetti, A. A. Mostofi // Phys. Rev. B. – 2011. – V. 84. – P. 035209.
8. Stillinger, F. H. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon / F. H. Stillinger, T. A. Weber // Phys. Rev. B. – 1985. – V. 31. – P. 5262–5271.

9. Tersoff, J. Modeling solid-state chemistry: interatomic potentials for multicomponent systems / J. Tersoff // *Phys. Rev. B.* – 1989. – V. 39. – P. 5566–5568.
10. Justo, J. F. Interatomic potential for silicon defects and disordered phases / J. F. Justo, M. Z. Bazant, E. Kaxiras, V. V. Bulatov, S. Yip // *Phys. Rev. B.* – 1998. – V. 58. – P. 253–2550.
11. Jelinek, B. Modified embedded atom method potential for Al, Si, Mg, Cu and Fe alloys / B. Jelinek, S. Groh, M. F. Horstemeyer, J. Houze, S. G. Kim, G. J. Wagner, A. Moitra, M. I. Baskes // *Phys. Rev. B.* – 2012. – V. 85. – P. 245102.
12. Puska, M. J. Convergence of supercell calculations for point defects in semiconductors: vacancy in silicon / M. J. Puska, S. Poykko, M. Pesola, R. M. Nieminen // *Phys. Rev. B.* – 1998. – V. 58. – P. 1318–1325.
13. Dannefaer, S. Monovacancy Formation Enthalpy in Silicon / S. Dannefaer, P. Mascher, D. Kerr // *Phys. Rev. Lett.* – 1986. – V. 56. – P. 2195–2198.
14. Watkins, G. D. Defects and Their Structure in Non-metallic Solids / G. D. Watkins. – N. Y.: Plenum, 1976.
15. Goedecker, S. A Fourfold Coordinated Point Defect in Silicon / S. Goedecker, T. Deutsch, L. Billard // *Phys. Rev. Lett.* – 2002. – V. 88. – P. 235501.
16. Wright, A. F. Density-functional-theory calculations for the silicon vacancy / A. F. Wright // *Phys. Rev. B.* – 2006. – V. 74. – P. 165116.
17. Al-Mushadani, O. K. Free-energy calculations of intrinsic point defects in silicon / O. K. Al-Mushadani, R. J. Needs // *Phys. Rev. B.* – 2003. – V. 68. – P. 235205.
18. Watkins, G. D. Defects in Irradiated Silicon: Electron Paramagnetic Resonance of the Divacancy / G. D. Watkins, J. W. Corbett // *Phys. Rev.* – 1965. – V. 138. – P. A543–A555.
19. Pellegrino, P. Annealing kinetics of vacancy-related defects in low-dose MeV self-ion-implanted *n*-type silicon / P. Pellegrino, P. Lévêque, J. Lalita, A. Hallén, C. Jagadish, B. G. Svensson // *Phys. Rev. B.* – 2001. – V. 64. – P. 195211.
20. Song, E. Fully relaxed point defects in crystalline silicon / E. Song, E. G. Kim, Y. H. Lee, Y. G. Hwang // *Phys. Rev. B.* – 1993. – V. 48. – P. 1486–1489.
21. Pesola, M. Spin-density study of the silicon divacancy / M. Pesola, J. von Boehm, S. Pöykkö, R. M. Nieminen // *Phys. Rev. B.* – 1998. – V. 58. – P. 1106–1109.
22. Staab, T. E. M. Stability of large vacancy clusters in silicon / T. E. M. Staab, A. Sieck, M. Haugk, M. J. Puska, Th. Frauenheim, H. S. Leipner // *Phys. Rev. B.* – 2002. – V. 65. – P. 115210.
23. Svensson, B. G. Annealing of divacancy-related infrared absorption band in boron-doped silicon / B. G. Svensson, K. Johnson, D. X. Xu, J. H. Svensson, J. L. Lindstrom // *Radiat. Eff. Def. Sol.* – 1989. – V. 111. – P. 439–447.
24. Tang, M. Intrinsic point defects in crystalline silicon: Tight-binding molecular dynamics studies of self-diffusion, interstitial-vacancy recombination and formation volumes / M. Tang, L. Colombo, J. Zhu, T. D. de la Rubia // *Phys. Rev. B.* – 1997. – V. 55. – P. 14279–14289.
25. Leung, W.-K. Calculations of Silicon Self-Interstitial Defects / W.-K. Leung, R. J. Needs, G. Rajagopal, S. Itoh, S. Ihara // *Phys. Rev. Lett.* – 1999. – V. 83. – P. 2351–2354.
26. Needs, R. J. First-principles calculations of self-interstitial defect structures and diffusion paths in silicon / R. J. Needs // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 1999. – V. 11. – P. 10437–10450.
27. Mattsson, A. E. Electronic surface error in the Si interstitial formation energy / A. E. Mattsson, R. R. Wixom, R. Armiento // *Phys. Rev. B.* – 2008. – V. 77. – P. 155211.
28. Centoni, S. A. First-principles calculation of intrinsic defect formation volumes in silicon / S. A. Centoni, B. Sadigh, G. H. Gilmer, T. J. Lenosky, T. D. de la Rubia, Ch. B. Musgrave // *Phys. Rev. B.* – 2005. – V. 72. – P. 195206.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты № 13-08-01335 А, № 13-01-12110 ОФИ-М).

Статья написана по материалам междисциплинарного научно-практического семинара «Математическое моделирование в материаловедении электронных наноструктур», проведенного в ВЦ РАН имени А. А. Дородницына.

Статья поступила в редакцию 25 декабря 2014 г.

ISSN 1609-3577 *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki* = *Materials of Electronics Engineering*. 2015, vol. 18, no. 1, pp. 23–30.

Influence of the *ab initio* Calculation Parameters on Prediction of Energy of Point Defects in Silicon

Mariya Gerasimovna Ganchenkova¹ — Cand. Sci. (Phys.–Math.), Senior Researcher (MGGanchenkova@mephi.ru); **Irina Anatolevna Supriadkina**² — Graduate Student the Faculty of Physics, Moscow State University, Research Associate at the Dorodnitsyn Computing Center of RAN (irinasupriadkina@mail.ru); **Karine Karlenovna Abgaryan**³ — Cand. Sci. (Phys.–Math.), Head of the Section (kristal83@mail.ru); **Dmitriy Igorevich Bazhanov**⁴ — Cand. Sci. (Phys.–Math.) (dmibaz@sols347-5.phys.msu.ru); **Ilya Vasylovich Mutigullin**³ — Cand. Sci. (Phys.–Math.), Senior Researcher (mutigul@ccas.ru); **Vladimir Alekseevich Borodin**² — Dr. Sci. (Phys.–Math.), Leading Researcher.

¹*National Research Nuclear University «MEPhI»,*

31 Kashirskoe shosse, Moscow 115409, Russia

²*National Research Centre «Kurchatov Institute»,*

1 Akademika Kurchatova Sq., Moscow 123182, Russia

³*Institution of Russian Academy of Sciences*

Dorodnitsyn Computing Centre of RAS,

40 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia

⁴*Lomonosov Moscow State University,*

1 Leninskiye Gory, Moscow 119991, Russia

Abstract. Point defects play a key role in many of the microelectronics device technologies. Knowledge of the properties of point defects and characteristics of their behavior during radiative synthesis of microstructures for use in silicon devices allows one to optimize the

conditions of their production, improve their quality and improve the electronic properties. To a large extent this was due to the complexity of measuring the parameters of point defects. In this situation, of valuable help in studying the properties of point defects is numerical modeling, especially with the use of quantum mechanical methods based on density functional theory approach.

The paper describes a systematic study of the effect of various quantum-mechanical simulation approximations influence the calculated energy parameters of defects as applied to simple point defects in silicon. We have demonstrated that the choice of the form of the exchange–correlation functional has the strongest effect on the predicted defect formation energy, whereas the variation of the other considered approximations is of secondary importance for simulation predictions.

Keywords: silicon, point defects, simulation.

References

1. Pelaz L., Marques L.A., Aboy M., López P., Santos I. Front-end process modeling in silicon. *Eur. Phys. J. B.* 2009, vol. 72, pp. 323–359.
2. Kohn W., Sham L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.* 1965, vol. 140, pp. A1133–A1138.
3. Perdew J.P., Chevary J.A., Vosko S.H., Jackson K. A., Peder-son M. R., Singh D. J., Fiolhais C. Atoms, molecules, solids, and sur-

faces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation. *Phys. Rev. B*. 1992, vol. 46, pp. 6671–6687.

4. Kresse G., Joubert D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method. *Phys. Rev. B*. 1999, vol. 59, pp. 1758–1775.

5. Vanderbilt D. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism. *Phys. Rev. B*. 1990, vol. 41, pp. 7892–7895.

6. Probert M. I. J., Payne M. C. Improving the convergence of defect calculations in supercells: An ab initio study of the neutral silicon vacancy. *Phys. Rev. B*. 2003, vol. 67, p. 075204.

7. Corsetti F., Mostofi A. A. The silicon vacancy: insights from large-scale electronic structure calculations and maximally-localized Wannier functions. *Phys. Rev. B*. 2011, vol. 84, p. 035209.

8. Stillinger F. H., Weber T. A. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon. *Phys. Rev. B*. 1985, vol. 31, pp. 5262–5271.

9. Tersoff J. Modeling solid-state chemistry: interatomic potentials for multicomponent systems. *Phys. Rev. B*. 1989, vol. 39, pp. 5566–5568.

10. Justo J. F., Bazant M. Z., Kaxiras E., Bulatov V. V., Yip S. Interatomic potential for silicon defects and disordered phases. *Phys. Rev. B*. 1998, vol. 58, pp. 2539–2550.

11. Jelinek B., Groh S., Horstemeyer M. F., Houze J., Kim S. G., Wagner G. J., Moitra A., Baskes M. I. Modified embedded atom method potential for Al, Si, Mg, Cu, and Fe alloys. *Phys. Rev. B*. 2012, vol. 85, p. 245102.

12. Puska M. J., Poykko S., Pesola M., Nieminen R. M. Convergence of supercell calculations for point defects in semiconductors: vacancy in silicon. *Phys. Rev. B*. 1998, vol. 58, pp. 1318–1325.

13. Dannefaer S., Mascher P., Kerr D. Monovacancy Formation Enthalpy in Silicon. *Phys. Rev. Lett.* 1986, vol. 56, pp. 2195–2198.

14. Watkins G. D. *Defects and Their Structure in Non-metallic Solids*. NY: Plenum, 1976.

15. Goedecker S., Deutsch T., Billard L. A Fourfold Coordinated Point Defect in Silicon. *Phys. Rev. Lett.* 2002, vol. 88, p. 235501.

16. Wright A. F. Density-functional-theory calculations for the silicon vacancy. *Phys. Rev. B*. 2006, vol. 74, p. 165116.

17. Al-Mushadani O. K., Needs R. J. Free-energy calculations of intrinsic point defects in silicon. *Phys. Rev. B*. 2003, vol. 68, p. 235205.

18. Watkins G. D., Corbett J. W. Defects in Irradiated Silicon: Electron Paramagnetic Resonance of the Divacancy. *Phys. Rev.* 1965, vol. 138, pp. A543–A555.

19. Pellegrino P., Lévêque P., Lalita J., Hallén A., Jagadish C., Svensson B. G. Annealing kinetics of vacancy-related defects in low-dose MeV self-ion-implanted n-type silicon. *Phys. Rev. B*. 2001, vol. 64, p. 195211.

20. Song E., Kim E. G., Lee Y. H., Hwang Y. G. Fully relaxed point defects in crystalline silicon. *Phys. Rev. B*. 1993, vol. 48, pp. 1486–1489.

21. Pesola M., von Boehm J., Pöykkö S., Nieminen R. M. Spin-density study of the silicon divacancy. *Phys. Rev. B*. 1998, vol. 58, pp. 1106–1109.

22. Staab T. E. M., Sieck A., Haugk M., Puska M. J., Frauenheim Th., Leipner H. S. Stability of large vacancy clusters in silicon. *Phys. Rev. B*. 2002, vol. 65, p. 115210.

23. Svensson B. G., Johnsson K., Xu D. X., Svensson J. H., Lindstrom J. L. Annealing of divacancy-related infrared absorption band in boron-doped silicon. *Radiat. Eff. Def. Sol.* 1989, vol. 111, pp. 439–447.

24. Tang M., Colombo L., Zhu J., de la Rubia T. D. Intrinsic point defects in crystalline silicon: Tight-binding molecular dynamics studies of self-diffusion, interstitial-vacancy recombination, and formation volumes. *Phys. Rev. B*. 1997, vol. 55, pp. 14279–14289.

25. Leung W.-K., Needs R. J., Rajagopal G., Itoh S., Ihara S. Calculations of Silicon Self-Interstitial Defects. *Phys. Rev. Lett.* 1999, vol. 83, pp. 2351–2354.

26. Needs R. J. First-principles calculations of self-interstitial defect structures and diffusion paths in silicon. *J. Phys.: Condens. Matter*. 1999, vol. 11, pp. 10437–10450.

27. Mattsson A. E., Wixom R. R., Armiento R. Electronic surface error in the Si interstitial formation energy. *Phys. Rev. B*. 2008, vol. 77, p. 155211.

28. Centoni S. A., Sadigh B., Gilmer G. H., Lenosky T. J., de la Rubia T. D., Musgrave Ch. B. First-principles calculation of intrinsic defect formation volumes in silicon. *Phys. Rev. B*. 2005, vol. 72, p. 195206.

Acknowledgements. The article was written based on an interdisciplinary scientific and practical seminar «Mathematical Modeling in Materials electronic nanostructures», held in the Institution of Russian Academy of Sciences Dorodnitsyn Computing Centre of RAS.

Received December 25, 2014

УДК 621.315.592:004.947

ДИСТАНЦИОННОЕ И СОПРЯЖЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА И ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЕ В ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ

© 2014 г. А. И. Простомолотов, Н. А. Вerezуб, Х. Х. Ильясов

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«Институт проблем механики им. А. Ю. Ишлинского Российской академии наук»,
просп. Вернадского, д. 101, корп. 1, Москва, 119526, Россия

Современный уровень развития вычислительной техники и программных средств позволяет осуществлять дистанционное моделирование физических процессов в технологических задачах с использованием сложных программных комплексов. Его преимущество состоит в том, что пользователи (*Клиенты*) комплекса выполняют всю творческую работу по подготовке и обработке расчетных данных на собственных компьютерах, а длительные вычисления осуществляют через Интернет-доступ на удаленном суперкомпьютере (*Сервере*), где находится программный комплекс.

Представлены примеры, иллюстрирующие применение такого комплекса программ *CrystmoNet* к ряду задач, связанных с сопряженным моделированием физических процессов при выращивании монокристаллов кремния методом Чохральского. Они включают результаты сопряженных расчетов гидродинамических процессов в расплаве с учетом его кристаллизации и радиационно-кондуктивного теплопереноса во всем объеме ростового теплового узла, а также термоупругих напряжений и распределений собственных точечных дефектов в бездислокационном монокристалле кремния.

Ключевые слова: сопряженное моделирование, комплекс программ, удаленный доступ, технологические примеры.

Введение

Проблема управления природой, содержанием, размерами и характером распределения присутствующих в бездислокационном монокристалле микро- и наноразмерных дефектов связана с разработкой эффективных способов воздействия на ансамбль собственных точечных дефектов в выращиваемом слитке и вырезаемых из него пластинах. Эффективным подходом является использование математических моделей, описывающих особенности теплопереноса в расплаве и выращиваемом кристалле. Такого рода математические модели и программы на их основе обеспечивают возможность оптимизации конструкций тепловых узлов и условий выращивания монокристаллов. Они закладывают прочную научную основу в конструирование новых поколений высокопроизводительного ростового оборудования и разработку новых эффективных технологических процессов выращивания.

В отличие от ряда зарубежных аналогов, предложенный авторами подход наиболее полно учитывает сопряженность физических процессов в тепловом узле установки выращивания. Более того, рассмотрен подход, связан-

ный с дистанционным моделированием процессов роста кристаллов и описанием соответствующего программного комплекса *CrystmoNet* [1]. Его основой стали программные модули для сопряженного моделирования теплопереноса при Cz-выращивании, разработанные авторами (*Crystmo* и дефектообразования *Defects* в бездислокационных кристаллах кремния (Si)), а также коммерческие комплексы (*Ansys®Fluent®* для гидромеханики, *Marc®Mentat®* для радиационно-кондуктивного теплообмена и твердотельной механики, *Tecplot-360®* для графического представления результатов).

Практическое использование возможностей дистанционного и сопряженного моделирования иллюстрируется примерами расчетов процессов теплопереноса, напряжений и дефектообразования при выращивании монокристаллов кремния по методу Чохральского (Cz) (рис. 1).

Комплекс программ удаленного доступа *CrystmoNet*

Программный комплекс *CrystmoNet* обеспечивает возможность дистанционной работы по схеме *Клиент–Сервер* на двух

Простомолотов Анатолий Иванович — доктор техн. наук, ведущий научный сотрудник, e-mail: prosto@ipmnet.ru; Вerezуб Наталия Анатольевна — кандидат физ.-мат. наук, старший научный сотрудник, e-mail: verezub@ipmnet.ru, Ильясов Хисам Хисамович — кандидат физ.-мат. наук, старший научный сотрудник, e-mail: ilyasov@ipmnet.ru

платформах: *MS Windows* на клиентском компьютере (*Клиенте*), и *Unix*-подобной на удаленном серверном компьютере (*Сервере*). На *Клиенте* устанавливается программа-оболочка *CrystmoNet-Shell*, управляющая работой комплекса, и пре/постпроцессор *Mentat*, служащий для ввода исходных данных и вывода результатов расчета.

Сервер лицензий, расчетные модули *Crystmo*, *Defects*, *Marc*, *Fluent* и графический постпроцессор *Tecplot* устанавливаются на *Сервере*. Обмен данными между *Клиентом* и *Сервером* осуществляется по схеме, представленной на рис. 2 [1].

Работа с комплексом начинается с запуска программы-оболочки на *Клиенте* и получения лицензии. *CrystmoNet-Shell* открывает окно *Server.data* (рис. 3), которое содержит входные данные, кнопки-команды для расчетных модулей и *Tecplot*.

С помощью программы-оболочки задаются данные о расположении отдельных компонентов и способах взаимодействия между ними. Контроль количества одновременно работающих приложений осуществляется сервером лицензий. Для получения лицензии на удаленную работу задаются данные по идентификации пользователя, сервера лицензий, номера порта для взаимодействия, которые должны быть согласованы с системным администратором комплекса. Наличие флажка *Remote work with PuTTY* позволяет на экране *Клиента* создавать эмулятор терминала *Сервера* для контроля выполнения заданий.

Модули *Marc*, *Fluent*, *Tecplot* имеют собственные окна для ввода входных данных, для *Crystmo* и *Defects* созданы окна *Crystmo.data* и *Defects.data*. Запуск расчетных модулей и *Tecplot* на *Сервере* с одновременным файловым обменом между *Клиентом* и *Сервером* начинается с нажатия на кнопку *Run* в окнах *Marc+Crystmo*, *Crystmo.run*, *Defects.run*, *Tecplot*. В окне *Marc+Crystmo* дается перечисление файлов и их форматов для пересылки от *Клиента* к *Серверу* и обратно.

Возможны два варианта запуска *Marc*. В первом случае расчет проводится только решателем *Marc*, и флажок *Run Mentat* отсутствует. Во втором случае выполняется сопряженный расчет по *Marc* и *Crystmo*. При этом в число файлов, копируемых на *Сервер*, включается Фортран-модуль *Crystmo.f*, который перед расчетом автоматически интегрируется в объектную среду *Marc* с образованием единого модуля *Marc+Crystmo*. Сопряженный расчет по модулям *Marc* и *Fluent*, *Marc* и *Defects*, *Marc* и *Crystmo* организуется на основе файлового обмена между ними. Графические построения в программе *Tecplot* выполняются на *Сервере* по данным расчета, которые могут быть скопированы в виде рисунков на компьютер *Клиента*.

Модуль *Marc* и пре/постпроцессор *Mentat*. С помощью модуля *Mentat* [2] выполняется подготовка входных данных для *Marc*-решателя: задается гео-

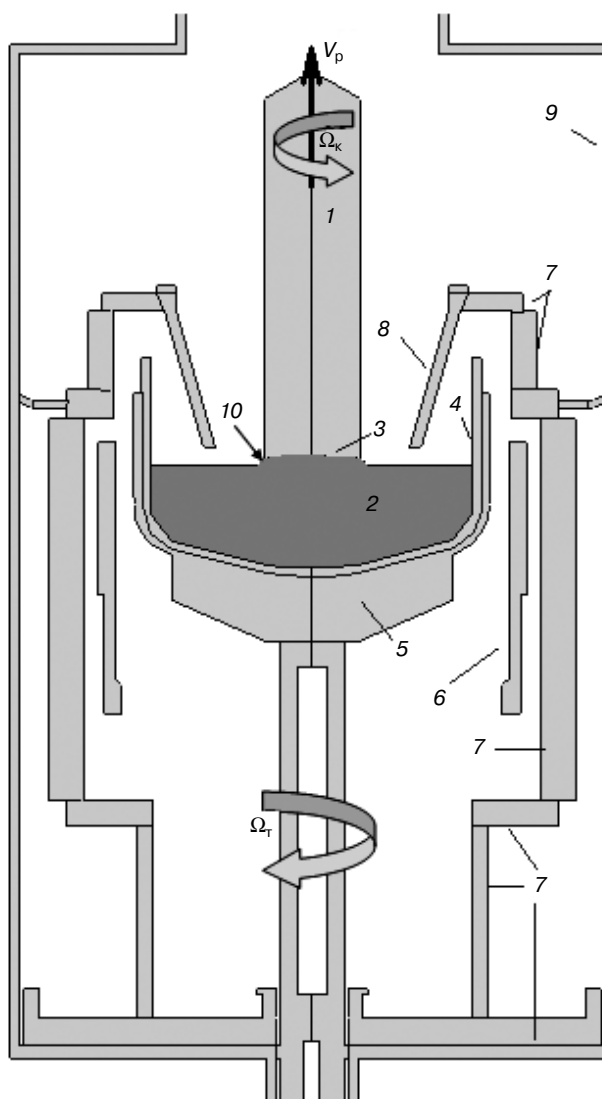


Рис. 1. Схема сопряженной математической модели выращивания кристаллов кремния методом Чохральского: 1 — кристалл; 2 — расплав; 3 — фронт кристаллизации (ФК); 4 — тигель; 5 — подставка; 6 — нагреватель; 7 — теплоизоляция; 8 — тепловой экран; 9 — водоохлаждаемый корпус; 10 — требуемое положение кромки ФК; V_p — скорость вытягивания кристалла из расплава; Ω_k , Ω_t — угловые скорости вращения кристалла и тигля соответственно

Fig. 1. Schematic of the conjugated mathematical mode of Czochralski silicon single crystal growth: (1) crystal, (2) melt, (3) crystallization front, (4) crucible, (5) graphite pad, (6) heater, (7) heat insulation, (8) heat screen, (9) water cooled enclosure, (10) required position of the crystallization front, V_p is the crystal pulling rate and Ω_c , Ω_{cr} are the angular speeds of the crystal and the crucible, respectively

метрия теплового узла, выполняется сеточное разбиение на конечные элементы.

Тепловой узел состоит из ряда компонент с различающимися материальными свойствами (см. рис. 1), для каждой из которых задаются свои теплофизические параметры (например, стальная камера, кристалл и расплав кремния, графитовые экраны и нагреватель). На внешней стенке водоохлаждаемой камеры теплового узла задается комнатная температура. Скорость вытягивания кристалла V_p и мощность нагревателя задаются данными в окне *Marc+Crystmo*. Радиационный теплоперенос

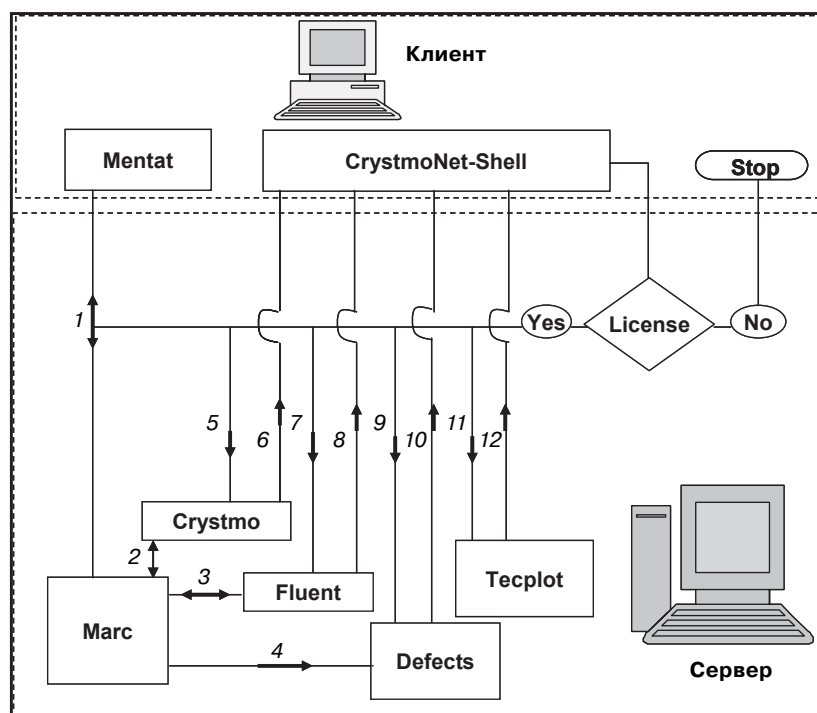


Рис. 2. Схема взаимодействия Клиент–Сервер с направлениями файлового обмена между модулями комплекса CrystmoNet [1]

Fig. 2. Client–Server interaction diagram showing file exchange directions between CrystmoNet modules [1]

в Cz–тепловом узле полагают в приближении «серого» тела и между взаимно видимыми поверхностями рассчитывают угловые коэффициенты.

Из окна *Mentat* выполняется запуск решателя *Marc* с учетом заданных параметров для задач теплопереноса. В процессе счета *Mentat* позволяет выполнять графический вывод результатов. Расчет термонапряжений и деформаций в кристалле осуществляется по рассчитанному полю температуры путем настройки соответствующего окна *Mentat* для задания материальных свойств и запуска решателя *Marc* для механического класса задач.

Одно из первых применений *Marc/Mentat* к Cz–процессу роста монокристаллов кремния было выполнено в работе [3], где описаны особенности его использования для радиационно–кондуктивного теплопереноса в тепловом узле без учета гидродинамики расплава. Однако самостоятельное и более широкое применение *Marc* к проблемам Cz–выращивания сдерживается отсутствием внутреннего программного модуля для моделирования процессов гидродинамики при реальных теплофизических и Cz–ростовых параметрах, соответствующих большим числам подобия (Рейнольдса, Рэлея, Марангони).

Модуль Crystmo. Разработанный авторами модуль *Crystmo* [4] служит для расчета гидродинамики и теплопереноса в расплаве для Cz–процесса. Трехмерные уравнения Навье–Стокса–Буссинеска и теплопереноса решаются в цилиндрических координатах методом конечных объемов. Теплофизические параметры расплава (вязкость, теплопроводность и т. д.) полагают постоянными. Сеточное

разбиение, настроечные и физические параметры задаются в табличном виде в окне *Crystmo.data*. Температура на границах расплава задается по результатам расчета в *Marc* для радиационно–кондуктивного теплопереноса. Для переноса данных с конечно–элементной сетки из *Marc* на сетку конечных объемов в *Crystmo* выполняется интерполяция. При сопряженном решении *Marc+Crystmo* рассчитанные в *Crystmo* компоненты скорости течения интерполируются на конечно–элементную сетку и передаются в *Marc*. Файловый обмен между Клиентом и Сервером и запуск *Crystmo* осуществляются с помощью окна *Crystmo.run*, аналогичного по виду окну *Marc+Crystmo*.

Модуль Fluent. Коммерческий модуль *Fluent* [5] используют как гидродинамическую программу с дополнительными возможностями для решения уравнений Навье–Стокса–Буссинеска и тепломассопереноса в областях сложной формы, с учетом кристаллизации расплава и для применения турбулентных моделей. Для подготовки входных данных и представления результатов расчетов имеется встроенный графический пре/постпроцессор.

Примеры отдельного применения *Fluent* для Cz–моделирования известны [6], однако варианты

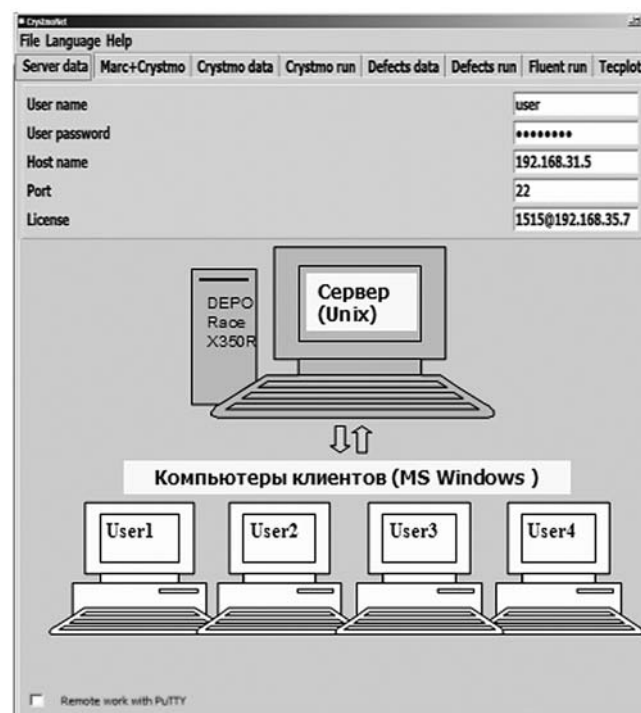


Рис. 3. Общий вид экранного меню с открытым окном *Server.data* для регистрации пользователя, с иллюстрацией взаимодействия Сервера и компьютеров Клиентов

Fig. 3. General view of the screen menu with the *Server.data* window open for user registration illustrating the interaction between the Server and the Client computers

его сопряжения с *Marc* отсутствуют. В *CrystmoNet* такое сопряжение построено по схеме файлового обмена. С этой целью разработаны подпрограммы, позволяющие задавать профили температуры на границах расплава и кристалла по данным *Marc* и передавать компоненты скорости расплава после расчета по *Fluent* в *Marc*. При передаче данных выполняется такая же интерполяция, как при расчете по *Marc+Crystmo*.

Модуль Defects. Разработанный авторами модуль *Defects* [7] рассчитывает процесс диффузии–рекомбинации собственных точечных дефектов (СТД) — вакансий и межузельных атомов кремния и образование микродефектов в растущем бездислокационном монокристалле кремния. При расчете используют температурное поле, полученное по *Marc* и *Crystmo* или *Marc* и *Fluent*.

Систему уравнений для расчета СТД–концентраций и плотности микродефектов решают методом конечных разностей. Сеточное разбиение, начальные и физические параметры задают в окне *Defects.data*. Файловый обмен между *Клиентом* и *Сервером*, а также запуск на счет *Defects* осуществляется с помощью окна *Defects.run*, аналогичного окну *Marc+Crystmo*. При обмене производится интерполяция данных между сетками.

Модуль Tecplot. Коммерческий пакет *Tecplot* [8] используют как универсальный и эффективный графический постпроцессор, позволяющий выполнять обработку численных результатов, полученных как методом конечных объемов, так и методом конечных элементов. Запуск модуля осуществляют в окне *Tecplot*, открываемом в общем экранном меню, показанном на рис. 3. Файловый обмен между *Клиентом* и *Сервером* обеспечивает загрузку результатов в *Tecplot*–формате для каждого из расчетных модулей.

Примеры моделирования Cz–процесса с использованием комплекса *CrystmoNet*

Расчет теплопереноса для Cz–процесса осуществляют на основе сопряжения радиационно–кондуктивной модели в *Marc* и моделей конвекции в *Crystmo* или *Fluent*. Расчеты термонапряжений и дефектообразования в кристалле выполняются в *Marc* и *Defects*.

Сопряженный теплоперенос. Вначале расчеты проводят в *Marc* в режиме кондуктивно–радиационного теплопереноса. Для учета кристаллизации задают переходной слой между расплавом и кристаллом в интервале $T_S < T < T_L$ (где $T_S = 1678$ К — температура солидуса и $T_L = 1688$ К — ликвидуса) с выделением скрытой теплоты плавления. Рассчитывается температурное поле в тепловом узле с итерационной коррекцией мощности нагревателя до величины, соответствующей заданному положению кромки фронта кристаллизации (см. точку 10

на рис. 1). Затем в *Crystmo* рассчитывается теплоперенос и поле скоростей в расплаве без учета кристаллизации. Поле скоростей копируется в *Marc*.

Сопряженный расчет *Marc+Fluent* повторяет *Marc+Crystmo*–последовательность. Из *Marc* во *Fluent* передаются распределения температур на границах расплава и кромке кристалла. Во *Fluent* теплоперенос рассчитывается совместно для кристалла и расплава с учетом кристаллизации и скорости V_p . Значения мощности нагревателя и скорости V_p корректируют в окне *Marc+Crystmo* при отсутствии флажка *Run Mentat*. При завышенной мощности возникает перегрев кристалла, и фронт кристаллизации (**ФК**) будет смещен вверх по кристаллу, что соответствует отклонению от задаваемого положения кромки ФК (см. точку 10 на рис. 1). В результате итерационной коррекции мощности и пересчета гидродинамики по *Fluent* достигается требуемое положение кромки ФК, соответствующее W–образной форме ФК на данной стадии выращивания кристалла (рис. 4, см. третью стр. обложки).

Приведенный выше расчет соответствует одной стадии выращивания (при фиксированной длине кристалла, глубине расплава и положении тигля). При моделировании всего ростового процесса с расчетом напряжений и дефектообразования в кристалле рассчитываются 10–20 таких стадий роста цилиндрической части слитка. Результаты расчетов собираются в базу данных. Для плавного изменения температурного поля применяют интерполяцию по времени между смежными стадиями. На этой основе строится тепловая история процесса, которая показывает динамику изменения теплового поля в тепловом узле и растущем кристалле.

Сопряженный расчет термонапряжений и дефектообразования. По модулю *Marc* рассчитывается термонапряженное состояние монокристалла кремния. Такой пример показан на рис. 5 (см. третью стр. обложки) для монокристалла кремния диаметром 100 мм на конкретной стадии выращивания с целью оценки возможностей возникновения критических напряжений, вызывающих пластическую деформацию и генерацию дислокаций. Получено, что расчетные значения напряжений не превышают критические. Их максимальное значение (7,6 МПа) достигается на боковой поверхности кристалла вблизи ФК, что обусловлено наличием наибольших градиентов температуры в этой области. При удалении от ФК напряжения быстро уменьшаются.

Следующим шагом сопряженного решения является построение тепловой истории выращиваемого монокристалла, а затем моделирование на ее основе процесса рекомбинации собственных точечных дефектов вблизи ФК. Аннигиляция вакансий и межузельных атомов вблизи ФК в значительной степени определяет их последующую миграцию и распределение в кристалле. Скорость аннигиляции равна разности между скоростями прямой реакции

рекомбинации и обратной реакции термической генерации пар собственных точечных дефектов. Скорость прямой (бинарной) реакции рекомбинации пропорциональна произведению концентраций взаимодействующих точечных дефектов. Скорость обратной реакции связана со скоростью прямой реакции законом действующих масс. В выращиваемом по методу Чохральского кристалле кремния перенос вакансий и межузельных атомов осуществляется в основном конвективной диффузией, процессом термомодификации пренебрегают.

В качестве примера на рис. 6 (см. третью стр. обложки) даны изолинии C_{iv} остаточных собственных точечных дефектов после их рекомбинации в монокристалле кремния в двух режимах: вакансионном и смешанном вакансионно-межузельном. Здесь $C_{iv} = C_i - C_v$, где C_i , C_v — концентрации межузельных атомов и вакансий соответственно. Различия вызваны разным соотношением скорости вытягивания V_p и осевого температурного градиента на ФК. В случае, представленном на рис. 6, а (см. третью стр. обложки), концентрация остаточных вакансий значительная, так как скорость вытягивания превышает критическую. Однако при ее снижении растет концентрация межузельных атомов, и при некотором критическом значении V_p происходит сужение вакансионной области к центру кристалла с расширением межузельной области, примыкающей к его боковой поверхности. Результатом расчета является радиальное распределение концентрации вакансий и межузельных атомов на верхней границе расчетной области.

Заключение

Показан алгоритм дистанционного применения известных коммерческих комплексов *Ansys®Fluent®* и *MSC.Marc®Mentat®* в сопряжении со специализированными программными модулями, разработанными авторами. Для этого разработана программная оболочка *CrystmoNet-Shell* на языке C++, которая предоставляет возможность удаленного доступа по схеме Клиент–Сервер для сопряженного численного решения широкого круга задач механики жидкости и твердого тела. Сопряженное моделирование обеспечивается специальными интерфейсами взаимодействия между модулями, функционирующими на клиентском компьютере под управлением

одной из разновидностей ОС MS Windows и сервере под управлением UNIX-подобной ОС.

Результаты работы комплекса программ *CrystmoNet* в режиме такого дистанционного решения сопряженных задач проиллюстрированы примерами для технологии Cz–выращивания кристаллов, где сопряженное моделирование включает: расчет радиационно–кондуктивного теплопереноса в ростовой установке и напряженно–деформированного состояния кристалла по *MSC.MarcMentat* с учетом данных расчета конвективного теплопереноса при кристаллизации расплава по модулям *Crystmo* или *AnsysFluent*, а также расчет дефектообразования по модулю *Defects* и графическую обработку по модулю *Tecplot–360*.

Предложенный подход позволяет существенно наращивать сопряженность технологической модели за счет использования уже широко известных и апробированных моделей механики сплошной среды, включенных в упомянутые выше коммерческие пакеты программ, а также дополнять их сопряжением с собственными новыми моделями и программными модулями пользователя, что дает более полный и адекватный учет особенностей процессов выращивания монокристаллов.

Библиографический список

1. Prostomolotov, A. CrystmoNet remote access code for Czochralski crystal growth modelling / A. Prostomolotov, H. Ilyasov, N. Verezub // Sci. and Technol. – 2013, Special Iss. – P. 18–25.
2. Introduction to MSC.Marc and Mentat: MAR101 course notes. Msc.Software Inc. 2007. <http://www.mssoftware.com/training-materials>
3. Virzi, A. Computer modelling of heat transfer in Czochralski silicon crystal growth / A. Virzi // J. Cryst. Growth. – 1991. – V. 112. – P. 699–722.
4. Гончаров, А. Л. Аппроксимация и численный метод решения трехмерных уравнений Навье–Стокса на ортогональных сетках / А. Л. Гончаров, М. Т. Девдариани, А. И. Простомолотов, И. В. Фрязинов // Математическое моделирование. – 1991. – Т. 3, № 5. – С. 89–109.
5. Ansys Fluent Tutorial Guide: Release 14.0. Ansys Inc. 2011. <http://www.ansys.com/Products/Simulation+Technology/Fluid+Dynamics>
6. Mokhtari, F. Combined effects of crucible geometry and Marangoni convection on silicon Czochralski crystal growth / F. Mokhtari, A. Bouabdallah, M. Zizi, S. Hanchi, A. Alemany // Cryst. Res. and Technol. – 2009. – V. 44, N 8. – P. 787–799.
7. Вереzub, Н. А. Взаимодействие собственных точечных дефектов при выращивании монокристаллов кремния методом Чохральского / Н. А. Вереzub, В. В. Воронков, М. Г. Мильвидский, А. И. Простомолотов // Поверхность. Рентгеновские, синхронные и нейтронные исследования. – 2001. – № 10. – С. 15–20.
8. Tecplot 360: User's Manual. Tecplot Inc. 2009. <http://www.tecplot.com/support/documentation>

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 12–02–01126, 14–08–00454).

Статья написана по материалам междисциплинарного научно–практического семинара «Математическое моделирование в материаловедении электронных наноструктур», проведенного в ВЦ РАН имени А. А. Дородницына.

Авторы благодарят В. Ежлова (ОАО «Гиредмет») за техническую поддержку и лицензионный доступ к *MSC.Marc®Mentat®* и *Tecplot–360®*.

Статья поступила в редакцию 24 апреля 2014 г.

ISSN 1609–3577 Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2015, vol. 18, no. 1, pp. 31–36.

Remote and Conjugated Modeling of Heat–Mass Transfer and Defect Formation in Technological Processes

Anatolii Ivanovich Prostomolotov — Leading Researcher, Dr. Sci. (Eng.) (prostom@ipmnet.ru); **Nataliya Anatol'evna Verezub** — Cand. Sci. (Phys.–Math.), Senior Researcher (verezub@ipmnet.ru); **Khislam Khislamovich Ilyasov** — Cand. Sci. (Phys.–Math.), Senior Researcher (ilyasov@ipmnet.ru).

Institute for Problems in Mechanics (IPMech) of Russian Academy of Sciences,
101/1 prospekt Vernadskogo, Moscow 119526, Russia

Abstract. The advanced development of computer technology and software makes possible remote simulation of physical processes in technological processes using complex software systems. Its advantage is that the users (*Clients*) carry out the main creative work (the preparation and treatment of the calculated data) on their own computers, but the long-time calculations are executed by means of Internet access on a remote supercomputer (*Server*) where the software package is installed. The presented examples illustrate an application of *CrystmoNet* code to a number of tasks related to the conjugated simulation of Czochralski silicon single crystal growth. They include results of conjugated calculations of the hydrodynamic processes occurring in the melt taking into account its crystallization and the radiation–conductive heat transfer in the entire volume of the crystal growth hot zone, as well as the thermal stresses and the distributions of intrinsic point defects in dislocation–free silicon single crystals.

Key words: conjugated modeling, program code, remote access, technological examples.

References

1. Prostomolotov A., Ilyasov H., Verezub N. CrystmoNet remote access code for Czochralski crystal growth modelling. *Science and Technology*. 2013, iss. Special (March), pp. 18–25. DOI: 10.5923/s.scit.201301.04
2. Introduction to MSC.Marc®&Mentat®: MAR101 course notes. MSC.Software Inc. 2007. <http://www.mssoftware.com/training-materials>
3. Virzi A. Computer modelling of heat transfer in Czochralski silicon crystal growth. *Journal of Crystal Growth*. 1991, vol. 112, pp. 699–722. DOI: 10.1016/0022-0248(91)90126-P
4. Goncharov A. L., Devdariani M. T., Prostomolotov A. I., Fryazinov I. V. Approximation and numerical method for solving three-dimensional Navier–Stokes equations in the orthogonal grids. *Matematicheskoe modelirovanie*. 1991, vol. 3, no. 5, pp. 89–109. (In Russ.)
5. ANSYS.Fluent® Tutorial Guide: Release 14.0. ANSYS Inc. 2011. <http://www.ansys.com/Products/Simulation+Technology/Fluid+Dynamics>
6. Mokhtari F., Bouabdallah A., Zizi M., Hanchi S., Alemany A. Combined effects of crucible geometry and Marangoni convection on silicon Czochralski crystal growth. *Crystal Research and Technology*. 2009, vol. 44, no. 8, pp. 787–799. DOI 10.1002/crat.200800580
7. Verezub N. A., Voronkov V. V., Milvidskii M. G., Prostomolotov A. I. Interaction of the intrinsic point defects into Cz growing silicon single crystals. *Poverkhnost'. Rentgenovskie, sinkhronnye i neitronnye issledovaniya = Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2001, no. 10, pp. 15–20. (In Russ.)
8. TECPLOT 360®: User's Manual. TECPLOT Inc. 2009. <http://www.tecplot.com/support/documentation>

Acknowledgements. This work was performed with financial support of RFFI (Grants No. 12–02–01126 and No. 14–08–00454).

The article was written based on an interdisciplinary scientific and practical seminar «Mathematical Modeling in Materials electronic nanostructures», held in the Institution of Russian Academy of Sciences Dorodnicyn Computing Centre of RAS.

The Authors wish to thank V. Ezhlov (OAO Giredmet) for technical support and providing licensed access to MSC.Marc®Mentat® and Tecplot–360®.

Received April 24, 2014

УДК 544.022.341:621.315.592

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ КЛАСТЕРОВ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В КРЕМНИИ НА БАЗЕ МОЛЕКУЛЯРНО–ДИНАМИЧЕСКОГО ПОДХОДА

© 2015 г. К. К. Абгарян, О. В. Володина, С. И. Уваров
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«Вычислительный центр РАН им. А. А. Дородницына»,
ул. Вавилова, д. 40, Москва, 119333, Россия

Введение

Механизм изменения и роста кластеров точечных дефектов в расширенные $\{113\}$ дефекты является одним из важных и недостаточно изученных вопросов, возникающих в процессе ионной имплантации тяжелых элементов в кристаллический кремний. На сегодняшний день получены экспериментальные данные о возможных типах кластеров точечных дефектов в кремнии [1–3]. Кроме того, проведено множество теоретических исследований их стабильности, трансформации во времени, в том числе при изменении температуры. При этом применяют различные подходы. Так, в работах [4, 5] теоретическое исследование точечных дефектов в кремнии, в том числе расчеты энергии формирования, проводили с применением первопринципных расчетов на базе теории функционала плотности [6, 7]. В работе [8] процесс миграции точечных дефектов в кремнии рассмотрен с применением методов молекулярной динамики в приближении сильной связи (*tight-binding molecular dynamics (TBMD) simulation method*). В работах [9, 10] представлены резуль-

таты экспериментального исследования методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) высокого разрешения сложных самоорганизованных дефектных структур, образовавшихся в кристаллическом кремнии в процессе ионной имплантации атомов Er с энергией 2 МэВ при температуре 600 °С. На основании данных ПЭМ и расчетов с использованием программного пакета HyperChem показано [9, 10], что данные дефектные структуры представляют собой объединение двух расщепленных межузельных атомов и дивакансии, выстроенных в цепочку в плоскости $\{113\}$. Еще в 1964 г. Г. Д. Уоткинс предсказал возможность существования таких дефектов [11]. Однако первое прямое наблюдение подобной упорядоченной структуры дефектных комплексов описано только в работах [9, 10]. Теоретическое исследование причин образования сложных дефектных структур — кластеров точечных дефектов в кремнии — и их трансформации во времени является сложной и актуальной задачей. Ниже предложен один из возможных подходов к ее решению и представлены результаты математического моделирования

Проведение теоретических исследований процессов формирования кластеров точечных дефектов — это важная задача на пути совершенствования технологий получения высокоэффективных светодиодов на основе кремния. Одним из способов получения кремния с фотолюминесцентными свойствами является радиационное воздействие, вызывающее образование различных дефектов в его структуре, в том числе точечных, протяженных их кластеров и комплексов. Для описания процесса формирования точечных дефектов и изучения их трансформации во времени и при изменении температуры разработана математическая модель на основе молекулярно–динамического подхода, позволяющего определять координаты и скорости всех частиц системы. Для описания взаимодействия между частицами использован многопараметрический потенциал Терсоффа со значениями параметров, подобранными в ходе решения задачи параметрической идентификации для кремния. При разработке модели использованы значения когезионной энергии системы, полученные из первопринципных расчетов на базе теории функционала плотности (DFT). Показано, что созданная компьютерная модель позволяет проводить молекулярно–динамическое моделирование кристаллической структуры кремния с точечными дефектами и их кластерами, а также визуализировать и выполнять анимацию результатов моделирования

Ключевые слова: многоуровневое моделирование, молекулярно–динамический подход, первопринципные расчеты, потенциал межатомного взаимодействия, кластеры точечных дефектов, III–V полупроводники, дефекты в кристаллах.

Абгарян Каринэ Карленовна¹ — кандидат физ.–мат. наук, зав. сектором, e-mail: kristal83@mail.ru; Володина Ольга Владимировна¹ — младший научный сотрудник, e-mail: olga25v@gmail.com; Уваров Сергей Игоревич¹ — младший научный сотрудник, e-mail: seruv25@gmail.com.

кластеров точечных дефектов в кремнии. Молекулярно–динамическое моделирование (МД–моделирование) кластеров точечных дефектов в кремнии выполняли с применением многопараметрического потенциала Терсоффа. Было проведено моделирование идеальной структуры кремния, а также структур кремния с различными точечными дефектами.

Моделирование кластеров точечных дефектов в кремнии

Для расчетов упорядоченных кластерных конфигураций вакансий и межузельных атомов применяли методы многомасштабного компьютерного моделирования, в которых расчеты на каждом уровне масштаба проводили с использованием соответствующих вычислительных моделей, методов и приближений. Атомно–кристаллическую и электронную структуру кремния с дефектом моделировали с помощью первопринципных расчетов в рамках теории функционала электронной плотности с использованием базиса плоских волн и PAW–потенциалов (программным комплексом VASP) [12]. При первопринципном моделировании структуры идеального кремния (без дефектов) использовали периодическую ячейку, состоящую из 64 атомов, размерностью $(2 \times 2 \times 2)$. Первопринципные расчеты проводили на супер–ЭВМ (вычислительных кластерах) Учреждения РАН Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН и на базе компьютерных ресурсов МГУ им. М. В. Ломоносова.

Моделирование изменения структуры с дефектом и с дефектными кластерами во времени осуществляли с применением гибридных алгоритмов, включающих в себя методы молекулярной динамики и оптимизационные методы [13], с помощью которых подбирали оптимальные значения параметров потенциалов межатомного взаимодействия. Причем результаты первопринципных расчетов рассматривали как эталонные. Для кремния в качестве потенциала межатомного взаимодействия использовали многочастичный потенциал Терсоффа [14], хорошо зарекомендовавший себя при решении задач моделирования соединений с ковалентными связями. В рамках метода Терсоффа когезионная энергия (E) системы атомов описывается следующим образом:

$$E = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_i V_{ij}; \quad (1)$$

$$V_{ij} = f_C(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})]; \quad (2)$$

$$f_R(r_{ij}) = A_{ij} \exp[-\kappa_{ij}(r_{ij} - R_e)]; \quad (3)$$

$$f_A(r_{ij}) = B_{ij} \exp[-\mu_{ij}(r_{ij} - R_e)]; \quad (4)$$

$$f_C(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} < R - R_{\text{cut}}; \\ \frac{1}{2} \left[1 + \cos \left(\frac{\pi(r_{ij} - R)}{2R_{\text{cut}}} \right) \right], & R - R_{\text{cut}} < r_{ij} < R + R_{\text{cut}}; \\ 0, & r_{ij} > R + R_{\text{cut}}. \end{cases} \quad (5)$$

Здесь r_{ij} — расстояния между атомами с номерами i и j соответственно; A_{ij} , k_{ij} — коэффициенты функции отталкивания; b_{ij} , B_{ij} , μ_{ij} — коэффициенты функции притяжения. Для однокомпонентного кремния потенциал Терсоффа включает 12 параметров, специфичных для моделируемого вещества: D_e , R_e , β , S , n , γ , λ , c , d , h , R , R_{cut} . При этом параметры R и R_{cut} определяются, исходя из полученных экспериментально геометрических характеристик вещества и не нуждаются в подборе.

Для идентификации параметров потенциала Терсоффа для кремния рассмотрим целевую функцию

$$F(\xi) = \omega_1 (E_{\text{coh}}(\xi) - E_{\text{coh}}^{\text{fpc}})^2 + \omega_2 (a(\xi) - a^{\text{fpc}})^2 + \\ + \omega_3 (B(\xi) - B^{\text{fpc}})^2 + \omega_4 (C'(\xi) - C'^{\text{fpc}})^2 + \\ + \omega_5 (C_{44}(\xi) - C_{44}^{\text{fpc}})^2 + \omega_6 (\zeta(\xi) - \zeta^{\text{fpc}})^2 \rightarrow \min, \quad (6)$$

$$\xi = (\xi_1, \dots, \xi_m),$$

где E_{coh} — когезионная энергия, зависящая от параметров потенциала Терсоффа; $a(\xi)$ — постоянная решетки, также зависящая от параметров потенциала; $B(\xi)$ — объемный модуль упругости; $C'(\xi)$ — модуль сдвига; $C_{44}(\xi)$ — постоянная эластичности; $\zeta(\xi)$ — постоянная Клейнмана; $\omega_1, \dots, \omega_6$ — весовые коэффициенты. Расчет всех этих значений проводили по формулам, приведенным в работах [13, 15], значение когезионной энергии рассчитывали по формулам (1)–(5). Вклад каждого квадрата разности в значение целевой функции определяли с помощью весовых коэффициентов. В качестве эталонных значений использовали значения когезионной энергии, полученные с помощью первопринципных расчетов. Суть процесса идентификации параметров потенциала состоит в нахождении такого набора параметров, при котором рассчитанные значения физических величин оказываются близкими к эталонным значениям, что выражается в достижении целевой функцией (6) минимального значения. Таким образом, решение задачи минимизации целевой функции обеспечивает нахождение оптимального набора параметров потенциала для описания структуры кремния.

Для поиска минимума целевой функции (6) использовали два алгоритма: метод Хука–Дживса [16] и метод Granular Radial Search [17]. Для обеспечения глобальности поиска и в том и в другом методе начальное приближение выбиралось случайным образом в пределах допустимого параллелепипеда.

К особенностям метода Granular Radial Search можно отнести введение значения гранулы, влияющей на вычисление шага, и отслеживание успешных шагов. Если 5 % шагов являются успешными, т. е. значение целевой функции уменьшается, то значение гранулы уменьшается. Алгоритм завершается, когда гранулярность становится меньше заданного значения или когда превышена верхняя граница по количеству итераций. Выполняется несколько таких итераций и из найденных значений выбирается минимальное.

Особенность метода Хука—Дживса заключается в комбинировании двух этапов поиска: исследующего поиска и поиска по образцу. Цель этапа исследующего поиска — выбор направления спуска путем исследования поведения целевой функции в окрестности точки, найденной на предыдущем шаге. В результате выбирается базисная точка. Поиск по образцу заключается в реализации шага по направлению из полученной базовой точки вдоль прямой, соединяющей полученную базисную точку с предыдущей базисной точкой.

Рассмотрим методы молекулярной динамики [18—21], позволяющие определять координаты и скорости всех атомов кристаллической структуры кремния. Каждый атом системы может быть описан уравнениями классической механики. Например, в случае уравнений движения, записанных в форме уравнений движения Ньютона, перемещение n -го атома описывается уравнением

$$m \frac{dv}{dt} = -\frac{dU}{dx}; \quad (7)$$

$$\mathbf{r}_n(t) = (x_n(t), y_n(t), z_n(t)), n = 1, \dots, N.$$

Набор скоростей N взаимодействующих частиц имеет вид

$$\mathbf{v}_n(t) = (u_n(t), q_n(t), w_n(t)), n = 1, \dots, N,$$

где m — масса атома; v — скорость атома; U — потенциал; $\mathbf{r}_n(t)$ — вектор координат атома n в момент времени t ; $x_n(t)$ — координаты атома n по оси Ox в момент времени t ; $y_n(t)$ — координаты атома n по оси Oy в момент времени t ; $z_n(t)$ — координаты атома n по оси Oz в момент времени t ; $\mathbf{v}_n(t)$ — вектор скорости атома n в момент времени t ; $u_n(t)$ — скорость атома n по оси Ox в момент времени t ; $q_n(t)$ — скорость атома n по оси Oy в момент времени t ; $w_n(t)$ — скорость атома n по оси Oz в момент времени t .

Для N взаимодействующих атомов можно записать нормальную систему Коши:

$$\begin{cases} m_n \frac{du_n}{dt} = -\frac{\partial U_n^{(x)}}{\partial x_n}; \\ m_n \frac{dq_n}{dt} = -\frac{\partial U_n^{(y)}}{\partial y_n}; \end{cases} \quad (8)$$

$$\begin{cases} m_n \frac{dw_n}{dt} = -\frac{\partial U_n^{(z)}}{\partial z_n}; \\ \frac{dx_n}{dt} = u_n, \frac{dy_n}{dt} = v_n, \frac{dz_n}{dt} = w_n. \end{cases}$$

где n — количество атомов, $n = 1, \dots, N$.

Для интегрирования поставленной задачи Коши был выбран метод скоростей Верле. Метод является стабильным и точным, а также самостартующим за счет того, что для получения следующего местоположения частицы учитывается еще и ее скорость. Этот метод является компромиссом между точностью и скоростью реализации.

Применив метод скоростей Верле, получим

$$\begin{aligned} r_n^{k+1} &= r_n^k + \tau_k v_n^k - \frac{\tau_k^2}{2} \frac{\partial U_n^k}{\partial r_n^k}; \\ v_n^{k+1} &= v_n^k + \frac{\tau_k}{2} \left(\frac{\partial U_n^{k+1}}{\partial r_n^{k+1}} + \frac{\partial U_n^k}{\partial r_n^k} \right), \end{aligned} \quad (9)$$

где n — количество атомов, $n = 1, \dots, N$; r — вектор координат атома; v — вектор скоростей атома; τ — шаг по времени.

Если сравнивать метод скоростей Верле с методом Рунге—Кутты, то вычисление ускорения на каждом временном шаге в методе Рунге—Кутты выполняется 4 раза, в то время как в методе скоростей Верле — только 1 раз. Таким образом, когда основное время затрачивается на вычисление ускорения, метод скоростей Верле оказывается в 4 раза быстрее. Также в методе Рунге—Кутты погрешность вычисления координаты накапливается, а в алгоритме скоростей Верле ошибка приводит к изменению частоты колебания, но при этом амплитуда и энергия остаются практически неизменными.

Результаты и их обсуждение

Была рассмотрена задача параметрической идентификации потенциала Терсоффа для кремния с кристаллической решеткой алмаза.

Область допустимых значений идентифицируемых параметров задавали параллелепипедом

$$X = [\underline{\xi}, \bar{\xi}] = \{\xi \in R^n : \underline{\xi}_i \leq x_i \leq \bar{\xi}_i\},$$

где

$$\underline{\xi} = (0,5, 0,5, 0,5, 5 \cdot 10^{-8}, 0,1, 5 \cdot 10^{-8}, 1 \cdot 10^{-2}, 10000, 0,1, -10);$$

$$\bar{\xi} = (5, 5, 10, 5, 5, 1, 10, 20000, 50, 10).$$

Начальные приближения выбирали из данной области случайным образом с применением метода Монте-Карло.

В качестве эталонных значений параметров потенциала Терсоффа для идеальной структуры кремния были выбраны значения параметров из работы [16]:

$$R = (2,36, 2,34, 1,46, 1,48, 0,94, 1,25 \cdot 10^{-6}, 1,46, 113031, 14,25, -0,42)$$

В результате работы двух алгоритмов были получены 200 наборов параметров методом Хука—Дживса и 200 наборов параметров методом Granular Radial Search, для которых значения целевой функции не превосходили 0,00001.

Необходимо отметить, что структурные свойства материала в рассмотренных выше процедурах вычисляются при неизменных относительных координатах атомов (относительные положения атомов в элементарной ячейке зафиксированы). Это не гарантирует того, что при полученном потенциале эти положения атомов будут соответствовать минимальной энергии [21]. Поэтому следующим шагом является МД-релаксация структуры. Для этого вычисляются силы, действующие на каждый из атомов элементарной ячейки (базисных атомов), после чего атомы смещаются в направлении действия сил до достижения ими положений, соответствующих минимуму энергии. Направления сил вычисляют с учетом градиента потенциальной энергии. В том случае, если для найденных параметров потенциала атомы значительно смещены от требуемых положений равновесия или свойства материала сильно отклонились от требуемых, необходимо провести повторное моделирование (подгонку), корректирующее некоторые из полученных параметров, с включением в число переменных координат тех атомов, отклонение которых выходит за заданные допустимые пределы. В таблице приведены лучшие наборы 10 параметров.

На рис. 1 и 2 представлены отклонения наборов параметров потенциала Терсоффа от эталонного значения (в %) для метода Хука—Дживса и для метода Granular Radial Search. Для большинства наборов параметров, полученных методом Granular Radial Search, отклонения значений рассчитанных параметров от эталонных значений оказались меньше,

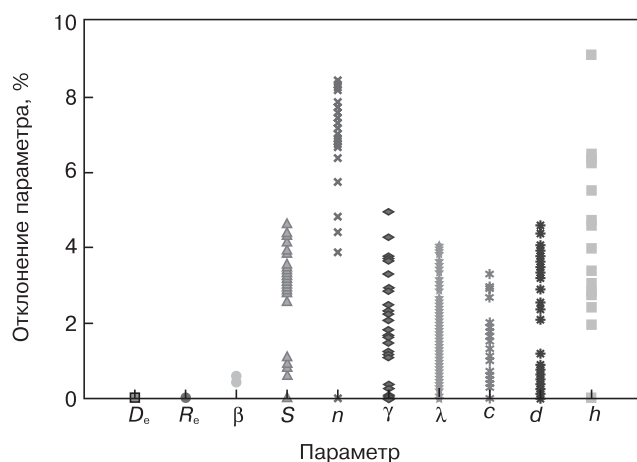


Рис. 1. Метод Хука—Дживса
Fig. 1. The Hook-Jives Method

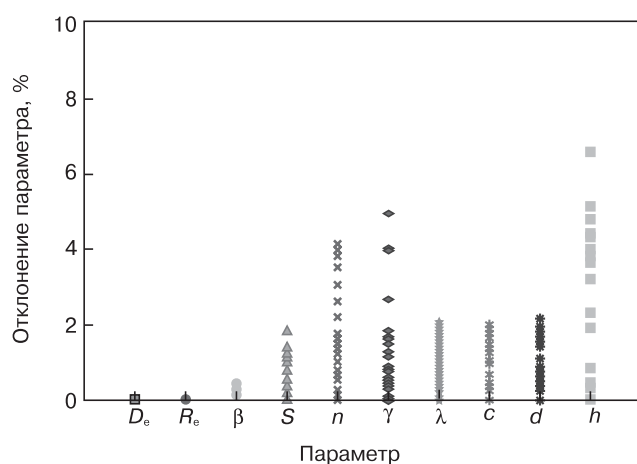


Рис. 2. Метод Granular Radial
Fig. 2. Granular Radial Search Method

чем для параметров, полученных методом Хука—Дживса (см. рис. 1 и 2).

Необходимо отметить, что использованные алгоритмы характеризуются большой вычислительной сложностью. Так, например, для решения задачи параметрической идентификации потенциала Терсоффа для однокомпонентного кремния с проверкой на оптимальность полученных 400 наборов параметров потребовалось более 6 ч. Вычислительная сложность при расчете одного набора параметров потенциала межатомного взаимодействия составляет $O(n^3)$, где n — количество атомов в системе. Сам алгоритм

Наборы параметров потенциала Терсоффа для Si Sets parameters for building Tersoff Si

№ п/п	D_e	R_e	β	S	n	γ	λ	c	d	h
1	2,363	2,3038	1,2539	0,0928	2,6644	$2,30 \cdot 10^{-7}$	0,295	112973	14,438	-1,0313
2	2,367	2,3283	1,2629	0,0124	2,6353	$5,85 \cdot 10^{-6}$	1,202	112974	14,281	-0,7220
3	2,363	2,3284	1,2628	0,9384	3,9504	$9,29 \cdot 10^{-7}$	3,394	112974	14,020	-1,3234
4	2,364	2,3284	1,2529	1,3943	2,7399	$2,01 \cdot 10^{-7}$	1,333	112974	14,940	-0,2340
5	2,364	2,3123	1,2303	1,9378	1,4929	$1,44 \cdot 10^{-6}$	0,125	112975	15,606	-0,3010
6	2,363	2,3274	1,2038	1,0192	2,3941	$1,97 \cdot 10^{-6}$	2,304	112972	14,284	-1,3829
7	2,363	2,3027	1,2123	2,0297	2,3950	$1,39 \cdot 10^{-6}$	0,323	112973	13,893	-0,3933

МД-моделирования, без учета затрат на параметрическую идентификацию потенциальной функции, имеет сложность вычисления $O(2n)$. Таким образом, сложность гибридных алгоритмов, включающих в себя методы молекулярной динамики и оптимизационные методы, применяемые для решения задачи параметрической идентификации, составляет порядка $O(2n^4)$. Поэтому в данной работе применяли распараллеливание по входным данным.

Набор параметров потенциала Терсоффа, обеспечивающий минимальное значение целевой функции, был использован для проведения МД-моделирования идеального кремния в структуре алмаза. Результаты МД-моделирования были близки к результатам первопринципных расчетов. Далее проводили МД-моделирование структуры кремния с различными дефектами (вакансией, примесным атомом замещения, внедрения, дивакансией и т. д.). Использовали периодические ячейки, содержащие 8 атомов, размерностью $(1 \times 1 \times 1)$, и 64 атома, размерностью $(2 \times 2 \times 2)$.

На рис. 3—6 (см. четвертую стр. обложки) показаны результаты МД-моделирования кремния с дефектами, визуализированные с помощью оригинального программного модуля, позволяющего выполнять анимацию и рассматривать изменение различных дефектов и дефектных кластеров во времени и в процессе изменения температуры соответственно.

Поскольку исследованные системы с дефектами оказались устойчивыми в процессе проведения расчета, был сделан вывод, что данные дефектные структуры являются метастабильными, что, в свою очередь, подтверждено первопринципными расчетами [21].

Заключение

Проведена идентификация оптимального набора коэффициентов потенциала Терсоффа для описания структуры и свойств монокристаллического кремния. Полученный потенциал позволил также провести молекулярно-динамическое моделирование точечных дефектов и малых кластеров точечных дефектов в структуре кремния. Результаты моделирования оказались близки к результатам первопринципных расчетов.

В дальнейшем запланировано проведение молекулярно-динамического моделирования структуры кремния с более сложными дефектными комплексами, а также исследование и визуализация трансформации протяженных дефектов во времени и при различных температурных режимах. В связи с вычислительной сложностью используемых алгоритмов в дальнейшем для решения поставленных задач планируется реализовать схему распределенных вычислений на супер-ЭВМ.

Библиографический список

1. Fedina, L. I. Electron microscopy data for threshold energy of point defect creation in silicon. / L. I. Fedina, A. L. Aseev, S. G. Denisenko, L. S. Smirnov // Materials Science Forum: Defects in Semiconductors. Edit. by H. J. Bardeleben. 1986. V. 10–12. – P. 1123–1128.
2. Aseev, A. L. Clusters of interstitial atoms in silicon and germanium / A. L. Aseev, L. I. Fedina, D. Hoehl, H. Barsch. – Berlin : Acad. Verlag, 1994. – 152 p.
3. Fedina, L. The intrinsic point defect clustering in Si: A study by HVEM and HREM in situ electron irradiation / L. Fedina, A. Gutakovskii, A. Aseev, J. Van Landuyt, J. Vanhellemont. – Novosibirsk : Kluwer Intern. Publish, 1997. – P. 63–92.
4. Al-Mushadani, O. K. Free-energy calculations of intrinsic point defects in silicon / O. K. Al-Mushadani, R. J. Needs // Phys. Rev. B. – 2003. – V. 68, iss. 23. – P. 235205.
5. Goedecker, S. A fourfold coordinated point defect in silicon / S. Goedecker, T. Deutsch, L. Billard // Phys. Rev. Lett. – 2002. – V. 88. – P. 235501.
6. Hohenberg, P. Inhomogeneous electron gas / P. Hohenberg, W. Kohn // Phys. Rev. B. – 1964. – V. 136, iss. 3. – P. B864.
7. Kohn, W. Self-consistent equations including exchange and correlation effects / W. Kohn, L. J. Sham // Phys. Rev. – 1965. – V. 140. – P. A1133–A1138.
8. Tang, M. Intrinsic point defects in crystalline silicon: Tight-binding molecular dynamics studies of self-diffusion, interstitial-vacancy recombination and formation volumes / M. Tang, L. Colombo, J. Zhu, T. Diaz de la Rubia // Phys. Rev. B. – 1997. – V. 55, iss. 21. – P. 14279–14289.
9. Fedina, L. I. Extended defects formation in Si crystals by clustering of intrinsic point defects studied by in-situ electron irradiation in an HREM / L. I. Fedina, A. K. Gutakovskii, L. A. Aseev, J. van Landuyt, J. Vanhellemont // Phys. status solidi (a). – 1999. – V. 171, iss. 1. – P. 147–157.
10. Fedina, L. I. Precision measurements of nanostructure parameters / L. I. Fedina, D. V. Sheglov, A. K. Gutakovskii, S. S. Kosolobov, A. V. Latyshev // Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing. – 2010. – V. 46, N 4. – P. 301–311.
11. Watkins, G. D. In radiation effects in semiconductors / G. D. Watkins. – N. Y. : Plenum Press Inc., 1968. – P. 67
12. VASP — <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>
13. Abgaryan, K. K. Optimization methods as applied to parametric identification of interatomic potentials / K. K. Abgaryan, M. A. Posypkin // Computational Mathematics and Mathematical Physics. – 2014. – V. 54, N 12. – P. 1994–2001.
14. Tersoff, J. Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties / J. Tersoff // Phys. Rev. B. – 1988. – V. 38. – P. 9902–9905.
15. Абгарян, К. К. Программный комплекс для решения задач параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия / К. К. Абгарян, М. А. Посыпкин // Internat. J. Open Information Technologies. – 2014. – № 10. – С. 14–20.
16. Хук, Р. Прямой поиск решения для числовых и статических проблем / Р. Хук, Т. А. Дживс. – М. : Мир, 1961. – С. 212–219.
17. Powell, D. Elasticity, lattice dynamics and parameterisation techniques for the Tersoff potential applied to elemental and type III–V semiconductors : dis. – University of Sheffield, 2006.
18. Абгарян, К. К. Применение параллельных вычислений и метода молекулярной динамики для моделирования роста многослойных полупроводниковых наноструктур / К. К. Абгарян, Н. В. Быков, И. В. Мутигуллин // Материалы IX Междунар. конф. по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ 2012). – М. : Изд-во МАИ, 2012. – С. 457–459.
19. Haile, J. M. Molecular dynamics simulation. elementary methods / J. M. Haile. – N. Y. ; Chichester ; Brisbane ; Toronto ; Singapore : J. Wiley and Sons Inc., 1992. – 505 p.
20. Rapaport, D. C. The art of molecular dynamics simulation / D. C. Rapaport. – Cambridge : Cambridge University Press, 1995. – 565 p.
21. Супрядкина, И. А. Теоретическое исследование ионно-индуцированных точечных дефектов и их комплексов в кремнии / И. А. Супрядкина, К. К. Абгарян, Д. И. Бажанов, И. В. Мутигуллин, Л. И. Федина // Материалы междунар. конф. ВИП. – Ярославль, 2013. – Т. 1. – С. 204–206.

Статья написана по материалам междисциплинарного научно-практического семинара «Математическое моделирование в материаловедении электронных наноструктур», проведенного в ВЦ РАН имени А. А. Дородницына.

Статья поступила в редакцию 21 января 2015 г.

ISSN 1609–3577 Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2015, vol. 18, no. 1, pp. 37–42.

Mathematical Modeling of Point Defect Cluster Formation in Silicon Based on Molecular Dynamic Approach

Karine Karlenovna Abgaryan¹ — Cand. Sci. (Phys.– Math.), Head of the Section (kristal83@mail.ru); **Olga Vladimirovna Volodina**¹ — Junior Research (olga25v@gmail.com); **Sergey Igorevich Uvarov**¹ — Junior Research (seruv25@gmail.com).

¹*Institution of Russian Academy of Sciences
Dorodnicyn Computing Centre of RAS,
40 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia*

Abstract. A very important task on the way of improving the technologies of synthesizing highly effective light-emitting diodes on the basis of silicon is theoretical research into the formation of point defect clusters. One method of obtaining silicon with photoluminescent properties is radiation impact. It causes the formation of various defects in its structure, including point and linear defects, their clusters and complexes. In this paper a mathematical model was used to determine the coordinates and velocities of all particles in the system. The model was used for describing of point defect formation processes and studying their evolution with time and temperature. The multi-parametrical Tersoff potential was used for the description of interactions between particles. The values of the Tersoff potential were selected by solving the parametrical identification problem for silicon. For developing the models we used the system cohesive energy values obtained by an ad initio calculation based on the density functional theory (DFT). The resultant computer model allows MD simulation of silicon crystal structure with point defects and their cluster with possible visualization and animation of simulation results.

Keywords: multi-scale modeling, molecular dynamic, first principles calculations, clusters of point defects, III–V semiconductors, defects in crystals.

References

1. Fedina L. I., Aseev A. L., Denisenko S. G., Smirnov L. S. Electron microscopy data for threshold energy of point defect creation in silicon. *Materials Science Forum: Defects in Semiconductors* / Edit. by H. J. Bardeleben. 1986, vol. 10–12, pp. 1123–1128. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.10–12.1123
2. Aseev A. L., Fedina L. I., Hoehl D., Barsch H. *Clusters of interstitial atoms in silicon and germanium*. Berlin: Academy Verlag, 1994. 152 p.
3. Fedina L., Gutakovskii A., Aseev A., Van Landuyt J., Vanhellefont J. *The intrinsic point defect clustering in Si: A study by HVEM and HREM in situ electron irradiation*. Novosibirsk: Kluwer Intern. Publish, 1997. pp. 63–92.
4. Al-Mushadani O. K., Needs R. J. Free-energy calculations of intrinsic point defects in silicon. *Phys. Rev. B*. 2003, vol. 68, iss. 23, pp. 235205. DOI: 10.1103/PhysRevB.68.235205
5. Goedecker S., Deutsch T., Billard L., A Fourfold coordinated point defect in silicon. *Phys. Rev. Lett.* 2002, vol. 88, p. 235501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.88.235501
6. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev. B*. 1964, vol. 136, iss. 3, p. B864. DOI: 10.1103/PhysRev.136.B864
7. Kohn W., Sham L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.* 1965, vol. 140, pp. A1133–A1138. DOI: 10.1103/PhysRev.140.A1133
8. Tang M., Colombo L., Zhu J., Diaz T. de la Rubia, Intrinsic point defects in crystalline silicon: Tight-binding molecular dynamics studies of self-diffusion, interstitial–vacancy recombination, and formation volumes. *Phys. Rev. B*. 1997, vol. 55, iss. 21, pp. 14279–14289.

DOI: 10.1103/PhysRevB.55.14279

9. Fedina L. I., Gutakovskii A. K., Aseev L. A., van Landuyt J., Vanhellefont J. Extended defects formation in Si crystals by clustering of intrinsic point defects studied by in-situ electron irradiation in an HREM. *Phys. status solidi (a)*. 1999, vol. 171, iss. 1, pp. 147–157. DOI: 10.1002/(SICI)1521-396X(199901)171:1<147::AID-PSSA147>3.0.CO;2-U
10. Fedina L. I., Sheglov D. V., Gutakovskii A. K., Kosolobov S. S., Latyshev A. V. Precision measurements of nanostructure parameters. *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*. 2010, vol. 46, no. 4, pp. 301–311.
11. Watkins G. D. *In radiation effects in semiconductors*. Ed. by Vook F. L. New York: Plenum Press Inc., 1968. p. 67
12. VASP — <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>
13. Abgaryan K. K., Posypkin M. A. Optimization methods as applied to parametric identification of interatomic potentials. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*. 2014, vol. 54, no. 12, pp. 1994–2001.
14. Tersoff J. Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties. *Phys. Rev. B*. 1988, vol. 38, pp. 9902–9905. DOI: 10.1103/PhysRevB.38.9902
15. Abgaryan K. K., Posypkin M. A. Software for solving problems of parametric identification of the interatomic interaction potential. *International Journal of Open Information Technologies*. 2014, no. 10, pp. 14–20. (In Russ.)
16. Huk P., Dzhihs T. A. *Prjamoj poisk reshenija dlja chislovyh i staticheskikh problem* [Direct search solution for numeric and static problems]. Moscow: Mir, 1961. pp. 212–219. (In Russ.)
17. Powell D. *Elasticity, lattice dynamics and parameterisation techniques for the Tersoff potential applied to elemental and type III–V semiconductors*: dis. University of Sheffield, 2006.
18. Abgaryan K. K., Bykov N. V., Mutigullin I. V. *Primenenie paralel'nyh vychislenij i metoda molekulyarnoj dinamiki dlja modelirovaniya rosta mnogoslojnyh poluprovodnikovyyh nanostruktur* [The use of parallel computing and molecular dynamics method to simulate the growth of multilayer semiconductor nanostructures]. *Materialy IX mezhdunarodnoj konferentsii po neravnovesnym protsessam v soplakh i struyakh (NPNJ 2012)*. Moscow: MAI, 2012. pp. 457–459. (In Russ.)
19. Haile J. M. *Molecular dynamics simulation. Elementary methods*. N. Y.; Chichester; Brisbane; Toronto; Singapore: J. Wiley and Sons Inc., 1992. 505 p.
20. Rapaport D. C. *The art of molecular dynamics simulation*. Cambridge: Cambridge University Press, 1995. 565 p.
21. Suprjadkina I. A., Abgaryan K. K., Bazhanov D. I., Mutigullin I. V., Fedina L. I. Teoreticheskoe issledovanie ionno-inducirovannyh tochechnykh defektov i ih kompleksov v kremnii [A theoretical study of ion-induced point defects and their complexes in silicon]. *Materialy mezhdunarodnoj kon-ferentsii VIP-2013*. Jaroslavl, 2013, vol. 1, pp. 204–206. (In Russ.)

Acknowledgements. This work was performed with financial support of RFFI (project No. 13–08–01335 A, No. 13–01–12110 OFI–M).

The article was written based on an interdisciplinary scientific and practical seminar «Mathematical Modeling in Materials electronic nanostructures», held in the Institution of Russian Academy of Sciences Dorodnicyn Computing Centre of RAS.

Received January 21, 2015

УДК 544.022.341:621.315.592:004.94

ИССЛЕДОВАНИЕ ПУТЕЙ ОПТИМИЗАЦИИ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ СОЛНЕЧНЫХ БАТАРЕЙ ВТОРОГО ПОКОЛЕНИЯ МЕТОДОМ МНОГОУРОВНЕВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

© 2015 г. Д. Н. Красиков¹, А. В. Книжник^{1,2}, А. В. Гавриков¹, Б. В. Потапкин^{1,2}¹ООО «Кинтех Лаб»,

пл. акад. Курчатова, д. 1, Москва, 123182, Россия

²НИЦ «Курчатовский институт»,

пл. акад. Курчатова, д. 1, Москва, 123182, Россия

Теоретическое исследование путей оптимизации свойств слоя поглотителя CdTe является важной задачей на пути повышения эффективности тонкопленочных солнечных элементов на основе гетероперехода CdTe/CdS. Свойства получаемых материалов, такие как плотность свободных носителей заряда, часто сильно зависят от параметров процессов осаждения слоев и их последующей обработки, в существенной степени определяющих дефектный состав получаемых материалов.

Для описания зависимости скорости процесса осаждения CdTe от температуры и потоков Cd и Te разработана модель на основе решеточного кинетического метода Монте–Карло.

Для определения влияния условий обработки CdTe на проводимость разработана квазихимическая модель, основанная на уравнении электронейтральности для концентраций точечных дефектов, описываемых константами реакций образования дефектов. При разработке моделей использованы значения параметров дефектов и реакций, полученных из первопринципных расчетов с помощью теории функционала плотности. Разработанная модель осаждения корректно описывает переход от испарения к осаждению, а также повышение скорости испарения при избытке Cd. Для объяснения наблюдаемых электрических свойств CdTe после обработки Si квазихимическая модель дефектов дополнена глубоким акцепторным комплексным дефектом, что позволило описать как высокотемпературную зависимость проводимости от давления кадмия, так и зависимость сопротивления от концентрации хлора при комнатной температуре.

Ключевые слова: многоуровневое моделирование, кинетический метод Монте–Карло, первопринципные расчеты, квазихимическая модель дефектов, II–VI полупроводники, дефекты в кристаллах, солнечные элементы.

Введение

Тонкопленочные солнечные элементы на основе гетероперехода CdTe/CdS достигли лабораторной эффективности 19,6 %, что сравнимо с конкурирующими технологиями на основе тонких пленок кремния и CuInGaSe [1]. Однако сохраняется существенный разрыв между эффективностью лучших лабораторных образцов и теоретическим пределом эффективности для элементов на одном гетеропереходе с шириной запрещенной зоны 1,5 эВ (~30 %). Известно, что одной из основных причин такого разрыва являются низкие значения напряжения холостого хода элемента, на формирование которого существенное влияние оказывает низкая концентрация ($\sim 10^{14} \text{ см}^{-3}$) свободных основных носителей заряда (дырок) в слое поглотителя CdTe. Цель работы — анализ путей увеличения концентрации свободных дырок в CdTe.

Среди путей увеличения концентрации свободных дырок рассматривают как увеличение концентрации собственных акцепторных дефектов (вакансия кадмия, V_{Cd}), так и введение примесных

акцепторных дефектов, которые в ионизованном состоянии повышают концентрацию дырок. Для повышения концентрации вакансий кадмия может быть применен метод выращивания кристалла в условиях избыточного давления паров теллура, что приводит к повышению соотношения концентраций $[\text{Te}]/[\text{Cd}]$ в кристалле. При этом скорость роста кристалла не должна сильно замедлиться, чтобы сохранить преимущество дешевизны процесса сублимации с близкого расстояния (close-space sublimation, CSS). Поэтому ниже будет рассмотрено, в том числе, моделирование роста кристалла CdTe при нестехиометрических условиях и разных температурах.

Одним из основных теоретических методов анализа свойств точечных дефектов являются первопринципные расчеты энергий образования и уровней ионизации дефектов. Процесс изготовления элемента включает несколько стадий нанесения, обработки и отжига при разных температурах, а конечные свойства материала должны быть рассчитаны при низкой температуре, после остывания. Поэтому необходимо ис-

Красиков Дмитрий Николаевич¹ — кандидат физ.–мат. наук, научный сотрудник, e-mail: krasikov@kintechlab.com; Книжник Андрей Александрович^{1,2} — кандидат физ.–мат. наук, руководитель проектов, e-mail: knizhnik@kintechlab.com; Гавриков Андрей Владимирович¹; Потапкин Борис Васильевич^{1,2} — кандидат физ.–мат. наук, генеральный директор, e-mail: potapkin@kintechlab.com.

пользование моделей, связывающих рассчитанные свойства дефектов со свойствами материала при низкой температуре и учитывающих влияние условий изготовления солнечного элемента. Разработана квазихимическая термодинамическая модель на основе уравнения электронейтральности, которая использована для анализа свойств CdTe после нанесения и обработки.

Моделирование осаждения CdTe

Химические процессы на поверхности CdTe(111)В, такие как диффузия, адсорбция и десорбция Cd и Te₂, исследовали с использованием функционала Perdew—Burke—Ernzerhof (PBE) [2] в рамках теории функционала плотности (DFT) [3] с остовными электронами, представленными псевдопотенциалами PAW [4], и валентными электронами, описываемыми с помощью плосковолнового базисного набора. Для расчетов применяли программу VASP [5]. Использовали гексагональную суперъячейку размером 1,623 × 1,623 × 4,0 нм³ (сетка k-точек — 2 × 2 × 1) с 6 слоями CdTe(111) и вакуумным зазором 1,7 нм.

Для оценки относительной стабильности различных поверхностных структур рассчитаны избыточные поверхностные энергии

$$E_s = \frac{E_{\text{tot}} - N_{\text{Cd}}\mu_{\text{Cd}} - N_{\text{Te}}\mu_{\text{Te}}}{A},$$

где E_{tot} — полная поверхностная энергия; μ_i — химический потенциал вещества; A — площадь поверхности ячейки моделирования; N_i — число соответствующих атомов. Равновесные условия определяют область стабильности $\mu_{\text{Cd}} + \mu_{\text{Te}} = \mu_{\text{CdTe}}$. Структуры с наименьшими избыточными энергиями показаны на рис. 1.

Энергия связи адсорбированных атомов (далее адатомов) Cd и Te уменьшается с увеличением их концентраций. Для концентраций свыше 0,25 моно-слоя образование ассоциатов адатомов (димеров, цепей, кластеров и т. д.) становится более выгодным по сравнению с изолированными атомами.

Для анализа кинетики роста/испарения CdTe использовали кинетическую модель Монте–Карло. Модель позволяет описать влияние локального окружения на скорости индивидуальных химических процессов. Был разработан собственный код для кинетического метода Монте–Карло, основанного на жесткой решетке с гранецентрированной сеткой, в которой каждый узел содержит Cd, Te, CdTe или остается пустым, представляя, таким образом, CdTe и вакансионные дефекты. Энергия каждого узла зависит от того, что он содержит, и от ближайшего окружения. Димеры и другие агрегаты учитывали неявно путем параметризации энергии. Энергии были затабулированы с использованием данных первопринципных расчетов. Энергии окружения каждого узла были подогнаны к базе данных пара-

метров, полученных из первопринципных расчетов. База данных включает 131 поверхностную структуру CdTe(111)В, 14 поверхностных структур CdTe(110), 23 поверхностные структуры CdTe(355), 45 структур объемных дефектов и 21 малый кластер CdTe. Нужно отметить, что размер базы данных меньше, чем число параметров, и некоторые параметры были получены интерполяцией.

Ячейка была периодической в двух направлениях с сеткой 32 × 32 × 128. Расчеты начинали с 32768 элементов CdTe в нижней части ячейки. Моделировали 3 типа событий:

- перескоки Cd/Te в соседние узлы;
- адсорбция Cd и Te₂ на поверхности CdTe;
- десорбция Cd и Te₂ с поверхности CdTe.

В каждый момент времени выбирали только одну химическую реакцию на основе ее скорости и полной скорости всех реакций с вероятностью

$$p_k^l = \frac{r_k^l}{\sum_i \sum_j r_j^i}; \quad r_j^i = v_j \exp\left(-\frac{E_a^j}{kT}\right),$$

где i, l — индексы узлов; k, j — индексы реакций.

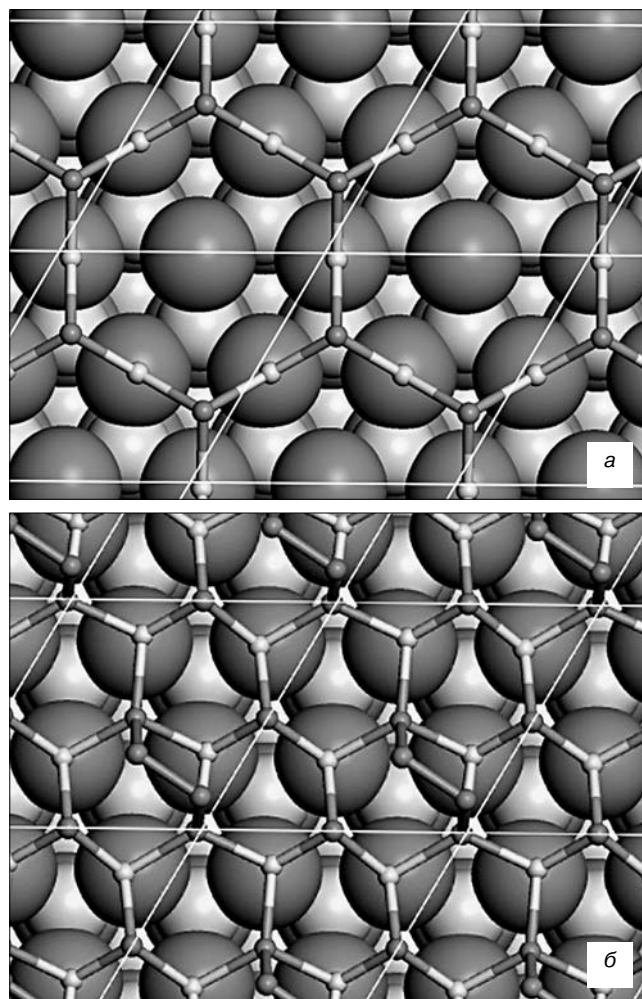


Рис. 1. Поверхностные структуры CdTe (111)В с наименьшей энергией:

а — Cd-избыточная структура; б — Te-избыточная
Fig. 1. Surface CdTe(111)B structures with lowest energy:
(a) Cd excess structure and (b) Te excess structure

Энергии активации событий рассчитывали как

$$E_a = \begin{cases} dE + E_b, & \text{если } dE > 0; \\ E_b, & \text{если } dE \leq 0, \end{cases}$$

где dE — изменение энергии в событии; E_b — энергетический барьер, параметризованный как функция окружения реакционного узла так, чтобы воспроизводить первопринципные энергии активации диффузии адатомов по поверхности и вакансий в объеме.

Результаты моделирования зависимости скоростей роста/испарения CdTe от падающих потоков Cd и Te₂ при ~500 и 600 °C показаны на рис. 2 (см. третью стр. обложки). Из рис. 2 (третья стр. обложки) видно, что переход от испарения к росту происходит недалеко от положения термодинамического равновесия [6], показанного сплошной линией. Следовательно, эти результаты говорят о том, что предсказание кинетики роста пленки CdTe на основе первопринципных данных может быть осуществлено в рамках такого подхода.

Для понимания того, что происходит с поверхностью CdTe при разных условиях, проанализировали состав поверхности. При ~600 °C при равных потоках атомов и при избытке Te поверхность почти плоская с содержанием адсорбированного Te до 40 %. Однако при избытке Cd адатомов мало. Вместо этого образуются большие (до 5 слоев) поверхностные шероховатости. Увеличенная шероховатость при высоких значениях отношения Cd/Te может объяснять ускорение испарения в условии избытка Cd.

Моделирование зависимости сопротивления CdTe от свойств дефектов

Для объяснения экспериментально наблюдаемого улучшения эффективности элемента CdTe/CdS после обработки CdCl₂ и понимания влияния примеси хлора на электрические свойства CdTe были проанализированы экспериментальные данные по проводимости нелегированных образцов CdTe и образцов, легированных атомами Cl. Для легированных образцов наблюдали увеличение проводимости n -типа при высоких температурах (600—700 °C) и существенное уменьшение проводимости при комнатной температуре. Для объяснения механизма такого поведения были рассчитаны свойства собственных дефектов CdTe и дефектов, образуемых атомами Cl, а также построена квазихимическая модель для описания проводимости при высокой температуре и после охлаждения.

Свойства собственных и примесных дефектов рассчитывали с использованием программы VASP с гибридным функционалом HSE06 [7], корректно воспроизводящим ширину запрещенной зоны и уровни ионизации дефектов. Установлено, что вакансии кадмия являются двойным акцептором с уровнями

ионизации 0,25 и 0,5 эВ, вакансии теллура и дефект замещения Cl_{Te} — мелкими донорами, межузельный дефект Cl_i — амфотерным с уровнем перехода +1/–1 при 0,83 эВ, дефектный комплекс Cl_{Te}Cl_{Cd} — двойным акцептором с уровнем перехода 0/–2 при 0,9 эВ. Рассчитанные энергетические барьеры для диффузии всех этих дефектов превышают 1 эВ. Таким образом, дефекты являются неподвижными при комнатной температуре, и может быть использована модель с «вмораживанием» концентраций дефектов.

Квазихимическая модель основана на реакциях образования различных дефектов. Концентрации дефектов определяются с помощью констант этих реакций, включающих энергии образования дефектов и химические потенциалы частиц, которыми система обменивается с резервуаром. Зависимость энергий образования дефектов от парциального давления паров Cd заложена в химическом потенциале Cd. Уравнение электронейтральности решается дважды — при высокой температуре для определения равновесных концентраций заряженных дефектов и при низкой температуре с замороженными дефектами для определения концентрации дырок и электронов. Подробное описание модели можно найти в работе [8].

Анализ модели показал, что в системе, содержащей только дефекты с мелкими уровнями ионизации (вблизи дна зоны проводимости и потолка валентной зоны), не может быть получено высокое сопротивление при комнатной температуре из-за наличия избыточной концентрации заряженных некомпенсированных дефектов [9]. Таким образом, для описания экспериментальных данных, полученных для образцов с высоким сопротивлением, необходимо использовать модель с дефектами, имеющими глубокие уровни ионизации вблизи середины запрещенной зоны CdTe.

Установлено, что для моделирования проводимости при высокой температуре достаточно следующих дефектов: вакансии кадмия, вакансии теллура и дефекта замещения Cl_{Te}. Значения энергий образования дефектов, полученные из первопринципных расчетов, были подогнаны (в пределах 20—30 %) для совпадения проводимости с экспериментальными данными. Расчеты показали, что модель с более низкой энергией образования Cl_i может описать высокое сопротивление при низкой температуре, но не может корректно описать зависимость проводимости от давления кадмия при 600—700 °C, так как из-за более сильной компенсации дефектов Cl_i^{–1} и Cl_{Te}⁺¹ дает проводимость CdTe : Cl ниже экспериментальной. Модель с более высокой энергией образования Cl_i позволяет описать все экспериментальные данные, так как при высокой температуре дефект Cl_{Te}⁺¹ компенсируется вакансией кадмия, а при низкой температуре избыточный заряд компенсируется перезарядкой глубокого акцептора Cl_{Te}Cl_{Cd}. Зависимости проводимости при высокой температуре и сопротивления при низкой температуре были смоделированы с одним и

тем же набором параметров для всех дефектов. На рис. 3 представлено сравнение результатов расчетов при высокой и комнатной температуре с экспериментальными данными из работ [10–13].

Расчеты выполнены с использованием суперкомпьютеров центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт».

Заключение

На основе первопринципных расчетов свойств элементарных процессов, происходящих при росте CdTe, разработана модель осаждения, способная предсказывать кинетику роста при различных потоках Cd и Te₂. В частности, модель описывает переход от испарения к осаждению и повышение скорости испарения при избытке Cd.

Для описания проводимости CdTe при разных условиях разработана квазихимическая модель. Установлено, что модель с дефектом, имеющим глубокий уровень ионизации, можно описать и как высокотемпературную зависимость проводимости от давления кадмия, и как зависимость сопротивления от концентрации хлора при комнатной температуре. В качестве такого глубокого дефекта предложен акцепторный комплекс Cl_{Te}Cl_{Cd} с уровнем перехода 0/–2 при 0,9 эВ.

Библиографический список

1. Green, M. A. Solar cell efficiency tables (version 42) / M. A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa, W. Warta, E. D. Dunlop // Progress in Photovoltaics Research and Applications. – 2013. – V. 21. – P. 827–837.
2. Perdew, J. P. Generalized gradient approximation made simple / J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // Phys. Rev. Lett. – 1996. – V. 77, N 18. – P. 3865–3868.
3. Kohn, W. Self-consistent equations including exchange and correlation effects / W. Kohn, L. J. Sham // Phys. Rev. A. – 1965. – V. 140, N 4. – P. 1133–1138.
4. Blöchl, P. E. Projector augmented-wave method / P. E. Blöchl // Phys. Rev. B. – 1994. – V. 50, N 4. – P. 17953–17979.
5. Kresse, G. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // Phys. Rev. B. – 1996. – V. 54. – P. 11169–11186.
6. Brebrick, R. High temperature thermodynamic data for CdTe(c) / R. Brebrick // J. Phase Equilibria and Diffusion. – 2010. – V. 31, N 3. – P. 260–269.
7. Krukau, A. V. Influence of the exchange screening parameter on the performance of screened hybrid functionals / A. V. Krukau, O. A. Vydrov, A. F. Izmaylov, G. E. Scuseria // J. Chem. Phys. – 2006. – V. 125. – P. 224106.
8. Grill, R. Point defects and diffusion in cadmium telluride / R. Grill, A. Zappettini // Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials. – 2004. – V. 48/49. – P. 209–244.
9. Krasikov, D. Why shallow defect levels alone do not cause high resistivity in CdTe / D. Krasikov, A. Knizhnik, B. Potapkin,

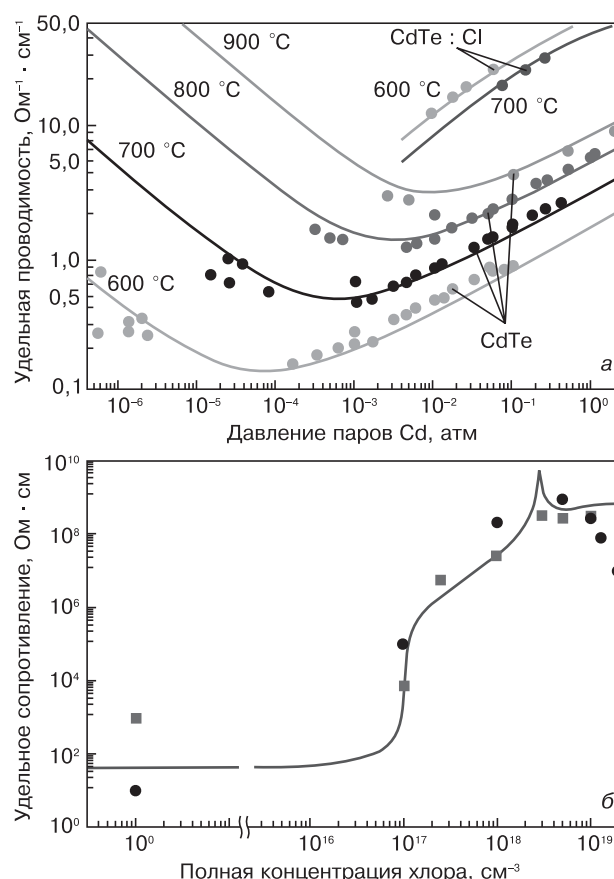


Рис. 3. Результаты расчетов проводимости (а) и сопротивления (б) CdTe: а — смоделированные (сплошные линии) и экспериментальные (точки) [10, 11] зависимости проводимости CdTe от давления кадмия; б — смоделированные (сплошная линия) и экспериментальные (точки) [12, 13] зависимости сопротивления CdTe от концентрации хлора при комнатной температуре

Fig. 3. CdTe conductivity (a) and resistivity (b) calculation results: (a) simulated (solid curves) and experimental (points [10, 11]) CdTe conductivity as a function of Cd pressure; (b) simulated (solid curves) and experimental (points [12, 13]) CdTe resistivity as a function of Cl concentration at room temperature

T. Sommerer // Semiconductor Science and Technology. – 2013. – V. 28. – P. 125019.

10. Franc, J. Galvanomagnetic properties of CdTe below and above the melting point / J. Franc, P. Höschl, R. Grill, L. Turjanska, E. Belas, P. Moravec // J. Electronic Materials. – 2001. – V. 30, N 6. – P. 595–602.

11. Grill, R. Chemical diffusion in CdTe: Cl / R. Grill, B. Nahlovskyy, E. Belas, M. Bugar, P. Moravec, P. Höschl // Semiconductor Science and Technology. – 2010. – V. 25. – P. 045019.

12. Popovych, V. D. The effect of chlorine doping concentration on the quality of CdTe single crystals grown by the modified physical vapor transport method / V. D. Popovych, I. S. Virt, F. F. Sizov, V. V. Tetyorkin, Z. F. Tsybrii (Ivasiv), L. O. Darchuk, O. A. Parfenjuk, M. I. Ilashchuk // J. Cryst. Growth. – 2007. – V. 308. – P. 63–70.

13. Shin, H.-Y. Temperature-gradient-solution grown CdTe crystals for γ-ray detectors / H.-Y. Shin, C.-Y. Sun // J. Cryst. Growth. – 1998. – V. 186. – P. 67–78.

Статья написана по материалам междисциплинарного научно-практического семинара «Математическое моделирование в материаловедении электронных наноструктур», проведенного в ВЦ РАН имени А. А. Дородницына.

Статья поступила в редакцию 25 декабря 2014 г.

Study of Optimization Options for Second Generation Solar Cell Materials by Multilevel Modeling

Dmitry Nikolaevich Krasikov¹ — Cand. Sci. (Phys.–Math.), Researcher, (krasikov@kintechlab.com); **Andrey Aleksandrovich Knizhnik**^{1,2} — Cand. Sci. (Phys.–Math.), Project Manager (knizhnik@kintechlab.com); **Andrey Vladimirovich Gavrikov**¹; **Boris Vasil'evich Potapkin**^{1,2} — Cand. Sci. (Phys.–Math.), General director (e-mail: potapkin@kintechlab.com)

¹**Kintech Lab Ltd.,**

1 Academician Kurchatov Sq., Moscow 123182, Russia

²**National Research Centre (NRC «Kurchatov Institute»)**

1 Academician Kurchatov Sq., Moscow 123182, Russia

Abstract. Theoretical analysis of optimization options for the properties of CdTe absorber layer is an important task for increasing the efficiency of CdTe/CdS heterojunction based thin-film solar cells. Properties of the materials (e.g. the density of free carriers) often depend essentially on the parameters of the deposition process and subsequent treatment which determine the defect composition of the material. In this work a model based on the lattice kinetic Monte-Carlo method is developed to describe the process of CdTe deposition as a function of temperature and Cd and Te fluxes. To determine the effect of the treatment conditions on CdTe conductivity, we developed a quasichemical model based on the electrical neutrality equation for point defects concentrations that are described by defects formation reaction constants. Parameter obtained from the first-principles density functional calculations were used when developing the models. The developed deposition model correctly describes the transition from evaporation to precipitation as well as the increased evaporation rates in excess of Cd. To explain the observed electrical properties of CdTe after Cl-treatment, we complemented the quasichemical defect model by a deep acceptor complex defect that allowed us to describe both the high-temperature dependence of conductivity on the Cd pressure and the dependence of resistivity on Cl concentration at room temperature.

Key words: multi-scale modeling, kinetic Monte Carlo, first principles calculations, quasichemical model for point defects, II–VI semiconductors, defects in crystals, solar cells.

References

1. Green M. A., Emery K., Hishikawa Y., Warta W., Dunlop E. D. Solar cell efficiency tables (version 42). *Progress in Photovoltaics Research and Applications*. 2013, vol. 21, pp. 827–837. DOI: 10.1002/pp.2404
2. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Phys. Rev. Lett.* 1996, vol. 77, no 18, pp. 3865–3868. DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>

3. Kohn W., Sham L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev. A*. 1965, vol. 140, pp. 1133–1138. DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>

4. Blöchl P. E. Projector augmented-wave method. *Phys. Rev. B*. 1994, vol. 50, pp. 17953–17979. DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.50.17953>

5. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B*. 1996, vol. 54, pp. 11169–11186. DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>

6. Brebrick R., High temperature thermodynamic data for CdTe(c). *J. Phase Equilibria and Diffusion*. 2010, vol. 31, no. 3, pp. 260–269. DOI: 10.1007/s11669-009-9644-5

7. Krukau A. V., Vydrov O. A., Izmaylov A. F., Scuseria G. E. Influence of the exchange screening parameter on the performance of screened hybrid functionals. *J. Chem. Phys.* 2006, vol. 125, pp. 224106. DOI: 10.1063/1.2404663

8. Grill R., Zappettini A. Point defects and diffusion in cadmium telluride. *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials*. 2004, vol. 48/49, pp. 209–244. DOI: 10.1016/j.pcrys-gro.2005.06.001

9. Krasikov D., Knizhnik A., Potapkin B., Sommerer T. Why shallow defect levels alone do not cause high resistivity in CdTe. *Semiconductor Science and Technology*. 2013, vol. 28, pp. 125019. DOI: 10.1088/0268-1242/28/12/125019

10. Franc J., Höschl P., Grill R., Turjanska L., Belas E., Moravec P. Galvanomagnetic properties of CdTe below and above the melting point. *J. Electronic Materials*. 2001, vol. 30, no. 6, pp. 595–602. DOI: 10.1007/BF02665840

11. Grill R., Nahlovskyy B., Belas E., Bugar M., Moravec P., Höschl P. Chemical diffusion in CdTe: Cl. *Semiconductor Science and Technology*. 2010, vol. 25, pp. 045019. DOI: 10.1088/0268-1242/25/4/045019

12. Popovych V. D., Virt I. S., Sizov F. F., Tetyorkin V. V., Tsybrii (Ivasiv) Z. F., Darchuk L. O., Parfenjuk O. A., Ilashchuk M. I. The effect of chlorine doping concentration on the quality of CdTe single crystals grown by the modified physical vapor transport method. *J. Cryst. Growth*. 2007, vol. 308, pp. 63–70. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2007.07.041

13. Shin H.-Y., Sun C.-Y., Temperature-gradient-solution grown CdTe crystals for γ -ray detectors. *J. Cryst. Growth*. 1998, vol. 186, pp. 67–78. DOI: 10.1016/S0022-0248(97)00483-1

Acknowledgements. The article was written based on an interdisciplinary scientific and practical seminar «Mathematical Modeling in Materials electronic nanostructures», held in the Institution of Russian Academy of Sciences Dorodnicyn Computing Centre of RAS.

Received December 25, 2014

УДК 538.975:621.315.592

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ И ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ТОНКИХ ПЛЕНОК AlN

© 2015 г. К. К. Абгарян¹, Д. И. Бажанов², И. В. Мутигуллин¹¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

«Вычислительный центр РАН им. А. А. Дородницына»,

ул. Вавилова, д. 40, Москва, 119333, Россия

²Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,

Ленинские горы, д. 1, Москва, 119991, Россия

Тонкие пленки нитрида алюминия часто применяют в качестве буферного слоя при выращивании полупроводниковых многослойных гетероструктур на основе нитрида галлия на кремниевой подложке с целью минимизации напряжений между подложкой и пленкой. Важной задачей является изучение электронных и структурных свойств тонких пленок нитрида алюминия. С помощью первопринципных расчетов в рамках теории функционала плотности проведено теоретическое исследование свойств Al-терминированной поверхности AlN(0001). Осуществлены расчеты поверхностной энергии указанной поверхности при различных значениях деформации растяжения и сжатия. Показано, что при рассмотренных в статье значениях деформации поверхностная энергия уменьшается в случае сжатия ячейки и увеличивается в случае растяжения. Получены значения поверхностной энергии, которые позволили рассчитать значение поверхностного напряжения. В рамках теории эластичности для случая свободного роста рассчитана кривизна поверхности пленки нитрида алюминия для различных значений толщины этой пленки. Установлено, что полученные расчетные значения кривизны близки к известным экспериментальным данным.

Ключевые слова: тонкие пленки, полупроводниковые гетероструктуры, первопринципные расчеты.

Введение

Одним из важнейших направлений современных высоких технологий является получение многослойных полупроводниковых наноструктур (МПНС) [1] с заданными параметрами и прогнозируемыми свойствами. В последние десятилетия в мире резко возрос интерес к широкозонным материалам (AlGaIn, GaN, SiC, алмаз), которые рассматривают как перспективные полупроводниковые материалы для изготовления новых электронных и оптоэлектронных приборов. Среди материалов этого класса можно выделить нитрид галлия, который обладает уникальными свойствами и является общепризнанным полупроводниковым материалом следующего поколения. К настоящему времени нитрид галлия используют в промышленном производстве светоизлучающих диодов, работающих в областях спектра синего и зеленого свечения.

Сейчас происходит быстрое развитие технологий синтеза структур на основе широкозонных материалов, предназначенных для получения СВЧ-приборов нового качества. Многослойные структу-

ры на основе широкозонных полупроводников потенциально имеют ряд существенных преимуществ при использовании их в качестве материала для производства СВЧ-транзисторов, что позволяет кардинально улучшить параметры как СВЧ-транзисторов, так и интегральных схем. Важным качеством преимуществом нитрида галлия перед другими широкозонными материалами является уже существующее промышленное производство многослойных структур на его основе, что обеспечивает широкие возможности вариации зонной структуры приборов, получение двумерного электронного газа (2DEG) с высокими параметрами.

При выращивании гетероструктур с наноразмерными толщинами слоев принципиально важным является понимание на микроскопическом уровне структуры границ раздела (интерфейсов) и начальной стадии роста. С точки зрения технологического применения наиболее удобным типом подложки для выращивания нитрида галлия является кремний, поскольку это недорогой материал, повсеместно применяемый в микроэлектронике. Кроме того,

Абгарян Каринэ Карленовна¹ — кандидат физ.-мат. наук, зав. сектором, e-mail: kristal83@mail.ru; Бажанов Дмитрий Игоревич² — кандидат физ.-мат. наук, e-mail: dmibaz@sols347-5.phys.msu.ru; Мутигуллин Илья Васильевич¹ — старший научный сотрудник, кандидат физ.-мат. наук, e-mail: mutigul@ccas.ru.

его можно получать в виде пластин большого диаметра. Однако нитрид галлия и кремний имеют существенное различие в коэффициентах термического расширения, что приводит к значительному прогибу МПНС при охлаждении до комнатной температуры и формированию сильных растягивающих напряжений в слое нитрида галлия. Результатом формирования растягивающих напряжений является растрескивание слоя нитрида галлия вдоль направлений $\{1\bar{1}00\}$. С целью минимизации напряжений между подложкой и пленкой и совершенствования свойств пленки при выращивании нитрида галлия на кремнии часто применяют буферный слой нитрида алюминия, который, в свою очередь, характеризуется собственными значениями механических напряжений и кривизны поверхности [2]. Таким образом, для понимания процесса формирования МПНС на атомарном уровне становится важным иметь представление об электронных и структурных свойствах получаемых буферных пленок нитрида алюминия на поверхности кремния.

Цель работы — исследование в рамках первопринципного подхода кривизны пленочной структуры AlN в зависимости от ее толщины и остаточного стресса, возникающего при эпитаксиальном росте на подложке Si(111), а также проведение первопринципных расчетов Al-терминированной поверхности AlN(0001).

Методика расчета

Исследование проводили в рамках теории функционала электронной плотности с использованием базиса плоских волн и PAW-потенциалов [3]. Для расчетов применяли программный комплекс VASP [4]. Для описания обменно-корреляционного взаимодействия было выбрано приближение локальной электронной плотности (ЛЭП). Для релаксации сил, действующих на ионы, использовали метод сопряженных градиентов. Динамическую релаксацию атомов проводили до тех пор, пока изменение полной энергии системы не становилось меньше 0,001 эВ. При этом остаточные силы, действующие на ионы, были меньше 0,1 эВ/нм. Энергию обрезания базиса плоских волн полагали равной 500 эВ. Расчеты электронной структуры осуществляли интегрированием в зоне Бриллюэна с использованием k -сетки, построенной по методу Монкхорста—Пака [5]. Размерность k -сетки для моделирования интерфейсов — $11 \times 11 \times 1$. Представленные выше значения для перечисленных параметров расчетной схемы были достаточны для обеспечения надежности полученных результатов.

Результаты и их обсуждение

Прежде всего были рассчитаны равновесные периоды решетки AlN в структуре вюрцита. Полу-

ченные значения периода решетки AlN ($a = 0,309$ нм, $c/a = 1,6$) хорошо согласуются с экспериментальными значениями ($a = 0,311$ нм, $c/a = 1,6$) [6]. При этом эффективный период решетки для поверхности Si(111), на которой чаще всего выращивают AlN, составляет $a'_{\text{Si}} = 0,382$ нм. Таким образом, рассчитанный период решетки AlN на 19 % меньше эффективного периода решетки кремния, что совпадает с экспериментальным значением рассогласования периодов решеток [7]. Столь сильное несовпадение параметров решеток приводит к возникновению в пленке AlN избыточного поверхностного стресса, который играет ключевую роль в деформации пленки и приводит к ее искривлению.

Для моделирования свойств пленки AlN, формируемой на подложке Si(111) рассматривали поверхность Al(0001), образование которой на такой поверхности Si наблюдали экспериментально [7]. В расчетах поверхностной энергии поверхность Al(0001) моделировали с помощью суперячейки размерностью (1×1) в плоскости XY, состоящей из 9 атомных слоев (5 слоев алюминия и 4 слоя азота). Толщину вакуумного слоя выбирали таким образом, чтобы две поверхности, образованные верхним и нижним атомными слоями (слэб), не взаимодействовали друг с другом из-за периодических граничных условий. Был проведен расчет поверхностной энергии для Al-терминированной поверхности (0001) AlN. Поскольку суперячейка состоит из неравного количества атомов двух типов, расчет поверхностной энергии проводили по формуле для нестехиометричных слэбов [8]:

$$\varepsilon = \frac{E_{\text{slab}}^{\text{N}} - N_{\text{Al}}\mu_{\text{AlN}}^{\text{bulk}} + (N_{\text{Al}} - N_{\text{N}})\mu_{\text{N}}}{2S}, \quad (1)$$

где $E_{\text{slab}}^{\text{N}}$ — полная энергия суперячейки, N_{Al} , N_{N} — количество атомов алюминия и азота в суперячейке соответственно; $\mu_{\text{AlN}}^{\text{bulk}}$ — химический потенциал структуры AlN в расчете на пару атомов Al—N; μ_{N} — химический потенциал азота в структуре молекулы N_2 в расчете на один атом; S — площадь поверхностной кристаллической ячейки.

Расчетное значение поверхностной энергии поверхности AlN(0001)—Al для равновесного периода решетки AlN составило 5,7 Дж/м², что хорошо согласуется с результатом первопринципного расчета, проведенного авторами работы [9], где было получено значение 5,68 Дж/м².

Деформацию решетки моделировали с помощью изменения периода решетки поверхностной элементарной ячейки AlN: −2 %, −1 %, 0, +1 %, +2 %. Рассчитанные значения поверхностной энергии приведены ниже.

Изменение параметра решетки, %	Поверхностная энергия S , Дж/м ²
−2	5,57
−1	5,63
0	5,70
1	5,74
2	5,75

Эти значения позволяют определить поверхностное напряжение (стресс) по формуле

$$g = \varepsilon + \frac{d\varepsilon}{de}, \quad (2)$$

где e — деформация поверхности. Рассчитанное значение производной $d\varepsilon/de$ составило 5,59 Дж/м². Таким образом, значение поверхностного напряжения, рассчитанное по формуле (2), составило 11,29 Дж/м².

Рассчитанное значение поверхностного напряжения пленки позволяет провести сравнительный анализ кривизны пленочной структуры AlN в зависимости от ее толщины и остаточного стресса, возникающего при эпитаксиальном росте на подложке Si(111) в рамках классической теории (3).

Для оценки кривизны пленки в зависимости от ее толщины и остаточного стресса использовали следующее соотношение, полученное в рамках теории эластичности:

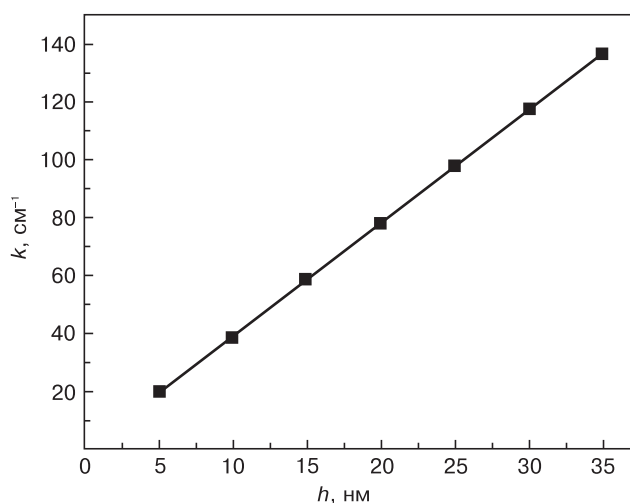
$$g^f = \frac{E_s h_s^2 k}{6 h_f (1 - \nu)}, \quad (3)$$

где индексами «f» и «s» обозначены параметры пленки и подложки соответственно; g^f — остаточный стресс в пленке; h_f , h_s — толщина пленки и подложки соответственно; E_s , ν — модуль Юнга и коэффициент Пуассона подложки; k — кривизна пленки.

При этом предполагали, что толщина пленки мала по сравнению с толщиной подложки ($h_f \ll h_s$) и что в пленке отсутствуют какие-либо объемные дефекты ($g = \text{const}$). На рисунке представлена зависимость кривизны k поверхности пленки от ее толщины h_f при свободном росте AlN на подложке кремния AlN/Si. При построении этой зависимости использовали следующие параметры AlN, согласно экспериментальным данным: $h_s = 200$ нм, $E = 308$ ГПа ($T = 300$ К), $\nu = 0,287$. Рассчитанные значения кривизны пленки AlN близки к экспериментально наблюдавшимся значениям кривизны тонких пленок AlN, выращенных на подложке кремния [10].

Заключение

С помощью первопринципных расчетов исследована зависимость поверхностной энергии поверхности AlN(0001)—Al от поверхностной деформации. Показано, что деформация сжатия поверхностных ячеек приводит к уменьшению поверхностной энергии AlN(0001)—Al, в то время как деформация растяжения — к увеличению поверхностной энергии. Полученные значения поверхностной энергии по-



Зависимость кривизны пленки AlN от толщины пленки для случая свободного роста AlN
AlN film curvature as a function of film thickness for free AlN growth

зволили оценить поверхностное напряжение тонкой пленки AlN в случае свободного роста. В рамках теории эластичности проведена оценка кривизны пленки AlN на подложке кремния в зависимости от толщины пленки AlN для случая свободного роста.

Библиографический список

1. Абгарян, К. К. Применение оптимизационных методов для моделирования многослойных полупроводниковых наносистем / К. К. Абгарян // Тр. Ин-та системного анализа Рос. акад. наук. Динамика неоднородных систем. — 2010. — Т. 53(3).
2. Meng, W. J. Growth of aluminum nitride thin films on Si(111) and Si(001): Structural characteristics and development of intrinsic stress / W. J. Meng, J. A. Sell, T. A. Perry, L. E. Rehn, P. M. Baldo // J. Appl. Phys. — 1994. — V. 75. — P. 3446—3456.
3. Blöchl, P. E. Projector augmented-wave method / P. E. Blöchl // Phys. Rev. — 1994. — V. 50, N 24. — P. 17953—17979.
4. Kresse, G. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // Phys. Rev. B. — 1996. — V. 54. — P. 11169—11186.
5. Monkhorst, H. Special points for Brillouin-zone integrations / H. Monkhorst, J. Pack // Phys. Rev. B. — 1976. — V. 13. — P. 5188.
6. Kukushkin, S. A. Substrates for epitaxy of gallium nitride: new materials and techniques / S. A. Kukushkin, A. V. Osipov, V. N. Bessolov, B. K. Medvedev, V. K. Nevolin, K. A. Tcarik // Rev. Adv. Mater. Sci. — 2008. — V. 17. — P. 1—32.
7. Litvinov, D. Transmission electron microscopy investigation of AlN growth on Si(111) / D. Litvinov, D. Gerthsen, R. Vöhringer, D. Z. Hu, D. M. Schaadt // J. Cryst. Growth. — 2012. — V. 338. — P. 283—290.
8. Batyrev, I. Ab initio calculations on the Al₂O₃(0001) surface / I. Batyrev, A. Alavi, M. W. Finnis // Faraday Discuss. — 1999. — V. 114. — P. 33—43.
9. Holec, D. Surface energies of AlN allotropes from first principles / D. Holec, P. H. Mayrhofer // Scripta Materialia. — 2012. — V. 67. — P. 760—762.
10. Zhu, D. Low-cost high-efficiency GaN LED on large-area Si substrate / D. Zhu, C. J. Humphreys // Proc. CS MANTECH Conf. — New Orleans (Louisiana, USA), 2013. — P. 269—272.

Статья написана по материалам междисциплинарного научно-практического семинара «Математическое моделирование в материаловедении электронных наноструктур», проведенного в ВЦ РАН имени А. А. Дородницына.

Статья поступила в редакцию 30 января 2015 г.

Theoretical Investigation of Electronic and Structural Properties of AlN Thin Films

Karine Karlenovna Abgaryan¹ — Cand. Sci. (Phys.– Math.), Head of the Section (kristal83@mail.ru); **Dmitriy Igorevich Bazhanov**² — Cand. Sci. (Phys.– Math.) (dmibaz@sols347–5.phys.msu.ru); **Ilya Vasylovich Mutigullin**¹ — Cand. Sci. (Phys.– Math.), Senior Researcher (mutigul@ccas.ru).

¹*Institution of Russian Academy of Sciences
Dorodnicyn Computing Centre of RAS,
40 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia*

²*Lomonosov Moscow State University
1 Leninskiye Gory, Moscow 119991, Russia*

Abstract. Study of the electronic and structural properties of AlN thin films is an important problem because these films are widely used as buffer layers for GaN-based semiconductor heterostructures growth on Si substrates. In this paper we performed a theoretical investigation of the properties of Al-terminated AlN(0001) surface in the framework of density functional theory. Ab initio calculations allowed us to study the impact of in-plane lattice strain on the surface energy of this surface. We show that the presence of the compressive strain leads to a decrease of the AlN(0001) surface energy while tensile strain increases the surface energy of this surface. Surface energy values allowed us to calculate the stress value of the surface under investigation. Also we calculated the curvature of the AlN surface as a function of film thickness for free growth. The resultant curvature values are in a good agreement with known experimental results.

Key words: thin films, semiconductor heterostructures, first principles calculations.

References

1. Abgaryan K. K. *Primenenie optimizatsionnykh metodov dlya modelirovaniya mnogoslownykh poluprovodnikovyykh nanosis-*

tem. Trudy Instituta sistemnogo analiza Rossiyskoy akademii nauk. Dinamika neodnorodnykh sistem. 2010, vol. 53(3). (In Russ.)

2. Meng W. J., Sell J. A., Perry T. A., Rehn L. E., Baldo P. M. Growth of aluminum nitride thin films on Si(111) and Si(001): Structural characteristics and development of intrinsic stress. *J. Appl. Phys.* 1994, vol. 75, pp. 3446–3456.

3. Blöchl P. E. Projector augmented-wave method. *Phys. Rev. B.* 1994, vol. 50, no. 24, pp. 17953–17979.

4. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B.* 1996, vol. 54, pp. 11169–11186.

5. Monkhorst H., Pack J. Special points for Brillouin-zone integrations. *Phys. Rev. B.* 1976, vol. 13, pp. 5188.

6. Kukushkin S. A., Osipov A. V., Bessolov V. N., Medvedev B. K., Nevolin V. K., Tcarik K. A. Substrates for epitaxy of gallium nitride: new materials and techniques. *Rev. Adv. Mater. Sci.* 2008, vol. 17, pp. 1–32.

7. Litvinov D., Gerthsen D., Vöhringer R., Hu D. Z., Schadt D. M. Transmission electron microscopy investigation of AlN growth on Si(111). *J. Crystal Growth.* 2012, vol. 338, pp. 283–290.

8. Batyrev I., Alavi A., Finnis M. W. Ab initio calculations on the Al₂O₃(0001) surface. *Faraday Discuss.* 1999, vol. 114, pp. 33–43.

9. Holec D., Mayrhofer P. H. Surface energies of AlN allotropes from first principles. *Scripta Materialia.* 2012, vol. 67, pp. 760–762.

10. Zhu D., Humphreys C. J. Low-cost high-efficiency GaN LED on large-area Si substrate. Proceedings of CS MANTECH Conf. New Orleans (Louisiana, USA), 2013. P. 269–272.

Acknowledgements. The article was written based on an interdisciplinary scientific and practical seminar «Mathematical Modeling in Materials electronic nanostructures», held in the Institution of Russian Academy of Sciences Dorodnicyn Computing Centre of RAS.

Received January 30, 2015

УДК 621.3.049

ПРОБЛЕМЫ НАДЕЖНОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ КОМПОНЕНТОВ

© 2015 г. В. А. Харченко

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«Вычислительный центр РАН им. А. А. Дородницына»,
ул. Вавилова, д. 40, Москва, 119333, Россия

Введение

Параметр надежности определяет период времени, в течение которого изделие сохраняет свои свойства. По данным открытой печати в космической отрасли и медицине, этот период достигает 30 лет, в военной и гражданских отраслях — колеблется в пределах 15—25 лет. К сожалению, российская промышленность в настоящее время не в состоянии обеспечить столь высокие показатели надежности. Об этом красноречиво свидетельствуют участвовавшие аварийные ситуации с российскими космическими объектами, а также возрастающий поток претензий от потребителей высокотехнологичной продукции (ВП). Исследования причин отказов показали, что наиболее ненадежным элементом устройств являются электронные компоненты (ЭК). Так, согласно работе [1], используемые ЭК российского и доступного иностранного производства (коммерческой и (или) индустриальной категории) не в состоянии обеспечить требуемый комплекс технических характеристик космических аппаратов, сроки их активного существования на орбите в условиях воздействия факторов космического пространства. В частности, спутники, обеспечивающие работу российской системы ГЛОНАСС, сохраняют свою работоспособность не более 3 лет, в то время как объекты си-

стемы GPS активно работают до 30 лет.

Цель работы — исследование факторов, отрицательно влияющих на надежность электронных компонентов, и путей их устранения как на стадиях разработки и изготовления, так и в процессе эксплуатации.

Организация отбраковочных испытаний

Одним из вариантов решения проблемы повышения надежности электронной системы изделий является организация комплекса дополнительных испытаний ЭК у потребителя. Комплекс предусматривает входной контроль, отбраковочные испытания, диагностический неразрушающий контроль, выборочный разрушающий контроль. В результате выбраковываются наиболее ненадежные компоненты. Для повышения надежности электронной системы в целом в необходимых случаях применяют многократное резервирование наиболее важных составных частей, а также устанавливают щадящий режим работы ЭК. В общем случае входной контроль проводится в объеме приемо-сдаточных испытаний, включающих проверку внешнего вида и электрических параметров, отражающих качество изделий. Отбраковочные испытания включают в себя электротермотрени-

Рассмотрены проблемы повышения надежности электронных компонентов (ЭК), используемых для производства высокотехнологичной продукции. На основе анализа литературных данных выделены два направления решения проблемы. Первое направление — отбраковка ЭК на входном контроле с применением специальных методов тестирования, совмещенная с электротермотренировкой по программе испытаний. Такие испытания позволяют выявить компоненты со «скрытыми дефектами», поддельные или контрафактные компоненты, а также компоненты с несовместимыми конструктивными материалами по своим электрофизическим свойствам как между собой, так и с условиями эксплуатации приборов у потребителя. Второе направление обусловлено особенностями создания ЭК с наноразмерными параметрами. В этом случае при проектировании приборов преимущественно применяют модульный принцип, который позволяет существенно снизить нагрузки на отдельный элемент, а при нарушении работы отдельного модуля он исключается из общей схемы с реконфигурацией структуры ЭК. Показано, что в общем случае проблема повышения надежности является комплексной задачей разработки оптимальной структуры элемента ИС, обоснованного выбора материалов и оптимизации схемотехнических решений с последующими испытаниями на входном контроле у потребителя.

Ключевые слова: электронные компоненты, надежность, отбраковочные испытания, совместимость материалов, наноразмерные структуры, схемотехнические решения, резервирование.

ровку, термоциклирование, выдержку при повышенной температуре. Диагностический неразрушающий контроль проводят по информативным параметрам в режимах и условиях, способствующих проявлению дефектов, а также по результатам оценки дрейфа параметров после испытаний. При выборочном разрушающем физическом анализе оценивается сохранение конструктивно-технологических параметров ЭК.

Несмотря на предпринимаемые меры, проблема надежности ЭК, используемых в создании электронных систем ВП, остается актуальной в связи с некоторыми развивающимися отрицательными тенденциями на рынке ЭК.

Первая тенденция связана с увеличением применения в военной технике (ВТ) коммерческих ЭК, вызванного настоятельной необходимостью снижения финансовых затрат на разработку и испытание изделий, сокращения сроков постановки на производство. Эффективность использования ЭК индустриального уровня в изделиях ВТ по сравнению с ЭК военного и космического уровня показана на рис. 1 [2]. Из рис. 1 видно, что цена ЭК индустриального уровня существенно ниже цен ЭК военного и космического уровня, но при этом другие показатели заметно выше.

Вторая тенденция связана с увеличением представительства на рынке ЭК новых фирм из Китая, стран Юго-Восточной Азии и других регионов, производящих компоненты сомнительного качества. Так, военное ведомство США, обеспокоенное участвовавшими случаями отказов в работе критически важных систем ВТ, запретило применение ЭК китайского производства [3].

Третья тенденция заключается в увеличении на рынке ЭК доли контрафактной продукции. Сегодня эта доля доходит до 10 %. Учитывая наличие на рынке поддельных ЭК, а также низкое качество поставляемых изделий иностранного и отечественного производства посредниками и недобросовестными фирмами, предприятиям-изготовителям ВТ приходится предпринимать организационно-технические меры, препятствующие попаданию в радиоэлектронную аппаратуру ЭК несоответствующего качества. В работах [2, 4–10] дано описание процедур контроля качества и надежности электрорадиоизделий (ЭРИ), предназначенных для производства космической аппаратуры. На рис. 2 показана типичная зависимость интенсивности отказов от времени для ЭК в различных исполнениях.

На первом этапе (этапе отбраковки) интенсивность отказов сначала возрастает,

затем после достижения максимума падает до стабильной величины. В период стабильной работы интенсивность отказов меняется незначительно. На третьем этапе интенсивность отказов снова возрастает в связи с физическим старением изделий. Точками показаны два режима отбраковки. Первый режим реализуется на заводе-изготовителе ЭК в службах технического контроля. Из рис. 2 видно, что времени отбраковочных испытаний на заводе-изготовителе совершенно недостаточно и в связи с этим потребителю попадают компоненты с высоким уровнем интенсивности отказов. Второй режим применяется при входном контроле предприятием-потребителем или в сертификационном центре. Отбраковка при входном контроле включает в себя и процесс тренировки ЭК. Причем режимы тренировки определяются составом и уровнем внешних воздействий. Каждый

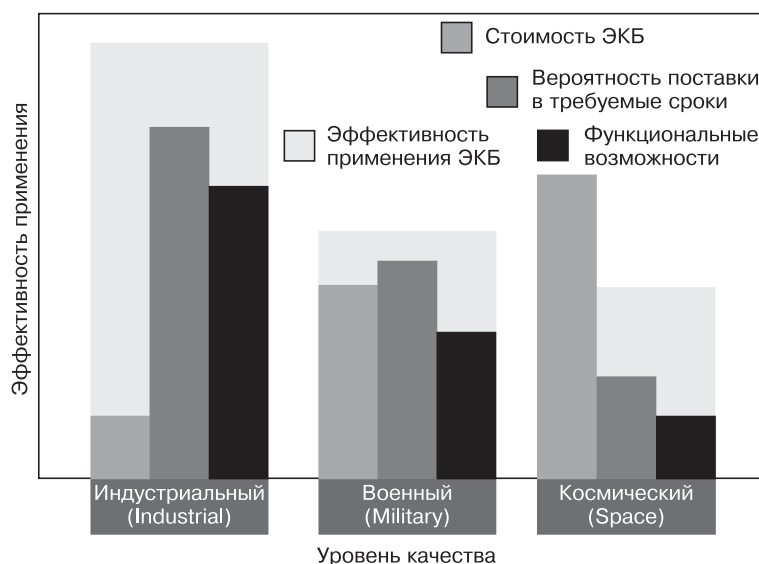


Рис. 1. Эффективность использования ЭК индустриального, военного и космического уровня качества в изделиях ВТ
Fig. 1. Operation efficiency of industrial, military and space quality grade in high-tech products

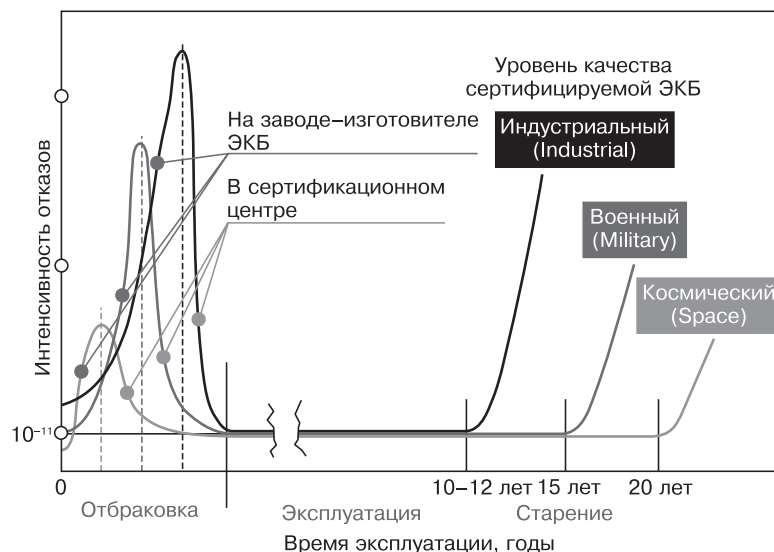


Рис. 2. Зависимости интенсивности отказов λ от времени эксплуатации ЭК
Fig. 2. Failure rate as a function of electronic components running time

вид воздействий провоцирует развитие конкретных механизмов отказов. Для сокращения сроков тренировки ЭК проводят при повышенных температурах и напряжении. ЭК, у которых параметры при тренировке изменились выше установленных норм, бракуют. Таким образом, предотвращается попадание в ответственную аппаратуру ЭК ненадлежащей надежности. Необходимо отметить, что режимы тренировки выбирают такими, чтобы не вызвать в ЭРИ новых дефектов. Причем эффективность процедуры отбраковки возрастает при дополнительном использовании разрушающего физического анализа (**РФА**) изделий микроэлектроники [11]. В состав испытаний РФА входят: измерения электрофизических параметров, контроль содержания паров влаги внутри корпуса, визуальный контроль чипа, контроль качества монтажа с использованием растрового электронного микроскопа, проверка прочности внутренних соединений, испытания на сдвиг и другие физико-химические методы. В случае обнаружения дефектов изготовления или отклоняется партия изделий, или установленная для испытуемых ЭК базовая интенсивность отказов увеличивается в зависимости от критериев РФА.

Столь тщательное проведение сертификационных испытаний позволяет создать базы данных по типам отказов, статистике отказов, по схемотехническим решениям с возникшими в них отказами, поставщикам ЭК с характеристиками качества и надежности.

Ниже приведены наиболее часто встречающиеся виды отказов и причины их возникновения.

Вид отказа	Возможные причины
Разрушение корпуса	Электрическая и (или) тепловая перегрузки
Электрические разрушения	Электрическая перегрузка, избыток влаги, загрязнения
Механические повреждения	Деформация из-за разных коэффициентов теплового расширения
Отслоение кристалла	Дефекты соединения кристалла с подложкой
Разрушение слоев металлизации	Электростатические разряды, коррозия, электрическая и (или) тепловая перегрузки
Электромиграция	Протекающий ток
Повреждение оксидных слоев	Электростатический разряд, поры
Коробление	Механические напряжения при термоциклировании
Дефекты кристаллов	Дефекты в объемных полупроводниках

При проведении разрушающего физического анализа обнаруживаются следующие типичные

нарушения конструктивно-технологических параметров:

- превышение содержания паров воды;
- остатки флюса и другие загрязнения на поверхности кристаллов;
- закрепленные и незакрепленные инородные частицы;
- коррозия;
- растравленные участки основного оксида;
- перемычки между коммутационными шинами;
- неполное закрепление кристалла на подложке.

В связи с резким снижением, а скорее, практически с полным прекращением производства радиационностойких ЭК, разработчики спутниковых систем были вынуждены использовать ЭК коммерческой категории. Очевидно, эти компоненты не столь надежны и обладают низкой радиационной стойкостью. Другими словами, для коммерческой категории попадание дефектных ЭК более вероятно, чем для ЭК, изготовленных по специальной «радиационно-стойкой» технологии. Проблема решается с помощью отбраковки дефектных компонентов (или выборки из партии качественных изделий) [12].

Известно, что в КМОП ИС более 60 % отказов обусловлены дефектами оксидной пленки. Экспериментально было установлено, что некоторые дефекты структуры могут образовывать скопления — макродефекты. Накопление заряда в макродефектах в процессе работы вызывает деградацию ИС и в конечном счете приводит к их отказу. Следует отметить, что ни после изготовления, ни после термотренировок выявить наличие макродефектов по электрическим измерениям не удастся, так как они электронейтральны. Экспериментально установлено, что эффективно дефекты оксидной пленки заряжаются под воздействием ионизирующих излучений. Дополнительная зарядка макродефектов, если они присутствуют в пленке, происходит и в процессе последующей термообработки при заданной температуре. Таким образом, было экспериментально показано, что после облучения и термообработки ЭК восстанавливают свои параметры, если в оксидной пленке отсутствуют макродефекты, и не восстанавливают в противном случае — при наличии в них макродефектов. Отобранные ЭК с восстановленными параметрами могут быть использованы в космических системах. Указанные испытания с помощью операции «облучение—термообработка» нашли отражение в национальных стандартах ряда стран.

Следует иметь в виду, что применение радиационно-термической обработки не выявляет все потенциально ненадежные ЭК, и при эксплуатации возникают случайные отказы. Проблему решают с помощью введения различных видов избыточности: аппаратной, режимной и информационной. Примером информационной избыточности может

служить кодирование информации (например, код Хеминга). В совокупности комплексное применение различных приемов повышения надежности даже для изделий коммерческой категории позволяет довести интенсивность случайных отказов до уровня требований космической категории $1 \cdot 10^{-8}—1 \cdot 10^{-9}$ ч⁻¹ в пересчете на ЭК.

Функциональная совместимость материалов

Рассмотрим еще один пример зависимости степени надежности ЭК от их режима работы и вида конструкционных материалов. В работе [13] исследовали СВЧ-транзисторы, работающие в импульсном режиме. Показано, что в большинстве случаев отказ СВЧ-транзисторов происходит по причине разрушения целостности проводников. Особенно это характерно для транзисторов, в которых в качестве проводника используют алюминий. В процессе активной работы процесс разрушения проводников наблюдается по достижении порядка 10^6 имп. При импульсном выбросе СВЧ-мощности происходит циклическое изменение температуры активного элемента транзистора и проводников «нагрев—охлаждение», приводящее к циклическому процессу расширения—сжатия. Следовательно, в проводниках возникают циклические механические напряжения. Так как алюминий не обладает высокой стойкостью к усталости металла при изгибе, то разрушение целостности проводника происходит при достаточно низких значениях количества импульсов. В отличие от алюминия, золото, например, обладает лучшими электрофизическими и механическими характеристиками. Поэтому оно находит применение в тех случаях, когда требуется повышенная надежность. В свою очередь, алюминий чаще применяют, когда не требуется высокая надежность, но критична цена. Отметим, что разрушения происходят, как правило, в точке крепления проводника к поверхности.

Другой причиной нарушения электрического контакта является образование интерметаллических соединений в точке крепления соединительного проводника на кристалле. Такая ситуация возникает, когда транзистор изготовлен с использованием алюминия, а корпус — с золотым напылением. При контакте алюминия и золота возможно образование интерметаллического соединения — «пурпурной чумы» — красноватого соединения AuAl_2 с низкой механической прочностью. В связи с этим использование связки золота и алюминия пагубно сказывается на надежности ЭК, особенно работающего в импульсном режиме.

Оптимизация структуры электронных компонентов

В заключительной части рассмотрим проблемы надежности при освоении ЭК с нанометровыми нормами. На очередном мировом форуме — ежегодной

Международной конференции по электронным приборам (6—9 декабря 2010 г., Сан-Франциско) было отмечено, что важнейшим аспектом новейшей микроэлектроники является надежность микросхем, так как новые перспективные технологии не могут гарантировать создание высоконадежных компонентов [14]. В связи с этим необходимы методы проектирования надежных электронных систем, изготавливаемых с использованием ЭК с низкой надежностью. Можно выделить несколько фундаментальных проблем, определяющих надежность будущих микросхем с наноразмерными топологическими нормами:

- влияние на надежность первоначальной обработки, а также температурной нестабильности смещения;

- влияние на надежность медной металлизации и диэлектриков с низким k , следующих факторов: электромиграции, формирования микропор под воздействием механических напряжений и пробоя диэлектриков, зависимость от времени (TDDDB — *time depend dielectric breakdown*);

- влияние масштабирования и новых архитектур на защищенность приборов от электростатического разряда.

Кроме того, на надежность существенное влияние оказывают разбросы параметров элементов микросхемы, причем разброс этот вызван термодинамическими вариациями физических и химических процессов, сопровождающих изготовление микросхем [15]. Основными технологическими источниками возникновения вариаций параметров являются следующие:

- неоднородность распределения легирующих примесей и структурных дефектов в наноразмерных объемах полупроводника, колебания толщины диэлектрических слоев;

- зернистая структура металлических и поликристаллических пленок;

- искажения, возникающие при литографии.

Уменьшить влияние вариаций на надежность можно несколькими путями. Первый из них — совершенствование технологии изготовления и обоснование выбора функциональных материалов. Второй путь — оптимизация схмотехнических решений. Например, уменьшить разброс параметров, связанный с неоднородностью распределения легирующих примесей в структурах КМОП-транзисторов, можно за счет увеличения концентрации примеси в областях истока и стока и снижения ее в подзатворной области. Однако при этом возрастают токи утечки «сток-исток» через подложку. Для снижения этого эффекта приходится модифицировать структуру МОП-транзисторов путем создания изолирующего диэлектрического слоя. Отметим, что для получения исходных пластин кремния с однородным распределением легирующей примеси фосфора можно применить метод легирования с использованием ядерных реакций [16].

Разброс таких параметров, как ток утечки «затвор–сток», пороговое напряжение, максимальный ток открытого транзистора, удастся снизить за счет увеличения толщины подзатворного диэлектрика при пропорциональном увеличении его диэлектрической проницаемости. В реальных структурах применяется чаще всего двухслойный диэлектрик. Первый слой создается на основе диоксида кремния толщиной ~1 нм, второй — на основе смеси оксида алюминия и гафния или диоксида гафния. Для снижения влияния поликремния с явно выраженной крупнозернистой структурой на разбросы параметров элементов ИС в настоящее время вместо поликремния используют нитрид титана, силициды вольфрама и тантала, которые имеют почти аморфную структуру и выдерживают без изменения технологические термообработки. Для снижения сопротивления проводников применяют многослойные структуры с проводящим слоем меди.

Примером компенсации технологических вариаций за счет оптимизации схемотехнических решений является архитектура СБИС типа «сеть на кристалле». Другими словами, кристалл прибора представляет матрицу из нескольких десятков и даже сотен модулей с множеством каналов связи. Такая архитектура позволяет решать задачи энергосбережения, синхронизации, непрерывного контроля функционирования, поддержания работоспособности ИС за счет компенсации различных дестабилизирующих факторов.

Оценки геометрических параметров локального вычислительного модуля с элементами структуры размером 45 нм дают геометрическую область 2×2 мм², в которой можно разместить до $3 \cdot 10^6$ транзисторов и необходимые сигнальные связи. Этого достаточно для реализации базового процессорного блока с локальной памятью, коммутатором и дополнительными функциональными блоками.

Предложенная архитектура «сеть на кристалле» позволяет не только оптимизировать общее потребление энергии системой, но и повысить ее надежность. Для этого в каждый модуль встраиваются средства контроля, которые управляют режимом работы и отслеживают сохранение правильного функционирования модуля и микросхемы при изменении температуры среды, условий охлаждения, а также при деградации параметров элементов с течением времени.

Средства повышения надежности, закладываемые в структуру современных СБИС с элементами наноразмерного уровня, подразделяются на три группы. В первую группу входят логические средства. К ним относятся кодовая защита блоков памяти, каналов связи, а также реализация распределенных вычислений с четкой, иерархически распределенной структурой памяти и оптимальными путями обращений к ней. Если логические средства обеспечения надежности не будут реализованы, то

системы на основе процессоров, работающих на максимальной частоте, будут потреблять ток до 1000 А при напряжении 1,0–1,2 В. Возникнут проблемы с отводом тепла и распределением тока по кристаллу. Такие СБИС могут оказаться просто неработоспособными. Ко второй группе относятся средства комплексного управления режимами: температурой, напряжением питания, частотой синхросигнала, напряжением смещения. Кроме того, контролируются токи утечки, уровень импульсных помех в цепях питания, задержки логических элементов. Третья группа включает в себя средства управления резервами системы, в случае, когда за счет различных дестабилизирующих факторов уровень ошибок начинает превышать установленный предел. Управление резервами осуществляется центральным блоком управления, имеющим связи со встроенными средствами контроля двух первых групп. В случае необходимости центральный блок принимает решение об изменении конфигурации «сети на кристалле» и перераспределении ресурсов, что позволяет сохранить работоспособность системы и обеспечить ее надежность в условиях воздействия дестабилизирующих факторов.

Заключение

Повышение надежности ЭК является комплексной проблемой, решение которой связано с оптимизацией структуры элементов ИС, обоснованным выбором конструктивных и технологических материалов и разработкой наиболее рациональных схемотехнических решений.

Библиографический список

1. **Хартов, В. В.** Космические проблемы электроники: перед употреблением — взболтать / В. В. Хартов // Электроника НТБ. – 2007. – № 7. – С. 22–25.
2. **Урличич, Ю.** Отбраковка контрафактной электронной компонентной базы в космическом производстве / Ю. Урличич, Н. Данилин, А. Степанов, Д. Чернов, А. Сашов, С. Белослудцев // Аэрокосмический курьер. – 2007. – № 1. – С. 76–77.
3. Контрафактные китайские чипы вызывают сбой в работе военной техники США / <http://haker.ru/2008/10/07/45479>
4. **Урличич, Ю.** Управление электронной компонентной базой в современных космических системах глобального позиционирования ГЛОНАСС / Ю. Урличич, Н. Данилин, А. Степанов, Д. Чернов, А. Сашов, С. Белослудцев // Аэрокосмический курьер. – 2007. – № 1. – С. 70–72.
5. **Урличич, Ю.** Алгоритм тестирования электронной компонентной базы для космических приборов системы ГЛОНАСС / Ю. Урличич, Н. Данилин, А. Степанов, Д. Чернов, А. Сашов, С. Белослудцев // Аэрокосмический курьер. – 2007. – № 1. – С. 73–75.
6. **Кобзарь, Д.** Процедурные вопросы применения электронных средств в военной технике: нормативная база и правда жизни / Д. Кобзарь // Стандартизация и сертификация. – 2007. – № 3. – С. 86–98.
7. **Урличич, Ю.** Противодействие проникновению контрафактных электронных компонентов на опыте создания ГЛОНАСС / <http://www.russianelectronics.ru/developer-r/review/doc/6683>
8. **Палкин, С.** Поиск аналогов электронных компонентов / С. Палкин // Электронные компоненты. – 2001. – № 6.
9. **Чесноков, В.** Коммерческие компьютеры окончательно прописываются в военных системах / В. Чесноков // Computer Weekly. – 1998. – № 6. – С. 27–30.

10. Едигеев, Т. Надежность компонентов — от практики к опыту инноваций / Т. Едигеев // Компоненты и технологии. — 2005. — № 8.

11. Федосов, В. В. Повышение надежности радиоэлектронной аппаратуры космических аппаратов при применении электрорадиоизделий, прошедших дополнительные отбраковочные испытания в специализированных испытательных технических центрах / В. В. Федосов, В. Е. Патраев // Авиакосмическое приборостроение. — 2006. — № 10. — С. 50—55.

12. Попов, В. Проблемы и возможности применения коммерческих интегральных схем в военной и космической технике / В. Попов // Chip News. — 1999. — № 5. — С. 28—32.

13. Дидилев, С. Особенности использования золота и алюминия в мощных СВЧ-транзисторах, работающих в импульсном режиме / С. Дидилев // Компоненты и технологии. — 2010. — № 5. — С. 15—18.

14. Гольцова, М. IEDM-2010. Новые процессы, новые материалы / М. Гольцова // Электроника НТБ. — 2011. — № 1. — С. 124—134.

15. Адамов, Д. Учет особенностей микроэлектронных нанотехнологий при проектировании СВИС / Д. Адамов // Электроника НТБ. — 2007. — № 7. — С. 98—105.

16. Смирнов, Л. С. Легирование полупроводников методом ядерных реакций / Л. С. Смирнов, С. П. Соловьев, В. Ф. Стась, В. А. Харченко. — Новосибирск: Наука, 1981. — 180 с.

Статья написана по материалам междисциплинарного научно-практического семинара «Математическое моделирование в материаловедении электронных наноструктур», проведенного в ВЦ РАН имени А. А. Дородницына.

Статья поступила в редакцию 25 декабря 2014 г.

ISSN 1609–3577 Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2015, vol. 18, no. 1, pp. 52–57.

Problems of Reliability of Electronic Components

Vyacheslav Aleksandrovich Kharchenko — Dr. Sci. (Eng.), Leading Researcher (vakh41@mail.ru)

**Institution of Russian Academy of Sciences
Dorodnicyn Computing Centre of RAS,
40 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia**

Abstract. This paper describes the problem of increasing the reliability of electronic components (EC) used for the fabrication of high-tech products. Two main ways of solving the problem are considered based on analysis of published data. One approach is Rejection of EC at the input control using special testing methods combined with burn-in test program. This testing reveals components with «hidden defects», counterfeit parts and components with incompatible construction materials both internal and with external service conditions. The other approach considers the feature of creating EC with nanoscale parameters. In this case the modular principle is applied for the design of devices that allows significantly reducing the loads on single elements, and malfunction of a discrete module causes its disconnection from the scheme followed by reconfiguration of the EC structure. We show that in general the problem of increasing reliability is a complex task related to developing an optimum structure of IC elements, informed choice of materials, testing and optimization of circuit solutions.

Keywords: electronic components, reliability, screening test, material compatibility, nanoscale structures, circuit solutions, reservation.

References

1. Hartov V. V. Electronics cosmic problems. Before using please shake up. *Jelettronika NTB*. 2007, no. 7, pp. 22—25. (In Russ.)
2. Urlichich Ju., Danilin N., Stepanov A., Chernov D., Sashov A., Belosludtsev S. Development of the contrafactual electronic component base. *Aerokosmicheskii kur'er = Aerospace courier*. 2007, no. 1, pp. 76—77. (In Russ.)
3. Counterfeit Chinese chips cause failure in work of military equipment of the US / <http://xaker.ru/2008/10/07/45479/>
4. Urlichich Ju., Danilin N., Stepanov A., Chernov D., Sashov A., Belosludtsev S. The management of electronic component base in the modern space global positioning system GLONASS. *Aerokosmicheskii kur'er = Aerospace courier*. 2007, no. 1, pp. 70—72. (In Russ.)
5. Urlichich Ju., Danilin N., Stepanov A., Chernov D., Sashov A., Belosludtsev S. The testing algorithm for the electronic component

base of the GLONASS equipment. *Aerokosmicheskii kur'er = Aerospace courier*. 2007, no. 1, pp. 73—75. (In Russ.)

6. Kobzar' D. Points of order of application of electronic means in military equipment: regulatory base and facts of life. *Standartizatsiya i sertifikatsiya*. 2007, no. 3, pp. 86—98. (In Russ.)

7. Urlichich Ju. Counteraction to penetration of counterfeit electronic components on experience of creation of GLONASS. <http://www.russianelectroniks.ru/developer-r/review/doc/6683> (In Russ.)

8. Palkin S. Search of analogs of electronic components. *Jelettronnyye komponenty*. 2001, no. 6. (In Russ.)

9. Chesnokov V. Commercial computers finally register in military systems. *Computer Weekly*. 1998, no. 6, pp. 27—30. (In Russ.)

10. Edigeev T. Reliability of components: from practice to experience of innovations. *Komponenty i tekhnologii*. 2005, no. 8. (In Russ.)

11. Fedosov V. V., Patraev V. E. Increase of reliability of the radio-electronic equipment of spacecrafts at application of the electroradio products which passed additional production tests in the specialized test technical centers. *Aviakosmicheskoe priborostroenie*. 2006, no. 10, pp. 50—55. (In Russ.)

12. Popov V. Problems and possibilities of application of commercial integrated schemes in military and space equipment. *Chip News*. 1999, no. 5, pp. 28—32. (In Russ.)

13. Didilev S. Features of use of aurum and aluminum microwave transistors working in the pulse mode. *Komponenty i tekhnologii*. 2010, no. 5, pp. 15—18. (In Russ.)

14. Gol'cova M. IEDM-2010. New processes, new materials. *Jelettronika NTB*. 2011, no. 1, pp. 124—134. (In Russ.)

15. Adamov D. Taking into account nanotechnologies features when developing VLST. *Jelettronika NTB*. 2007, no. 7, pp. 98—105. (In Russ.)

16. Smirnov L. S., Solov'ev S. P., Stas' V. F., Kharchenko V. A. Legirovanie poluprovodnikov metodom jadernykh reakcij [Semiconductor doping by nuclear reaction method]. *Novosibirsk: Nauka*, 1981. 180 p. (In Russ.)

Acknowledgements. The article was written based on an interdisciplinary scientific and practical seminar «Mathematical Modeling in Materials electronic nanostructures», held in the Institution of Russian Academy of Sciences Dorodnicyn Computing Centre of RAS.

Received December 25, 2014

МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИЯ. ПОЛУПРОВОДНИКИ

MATERIALS SCIENCE AND TECHNOLOGY. SEMICONDUCTORS

Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2015. Т. 18, № 1. С. 58–61.
ISSN 1609–3577. DOI: 10.17073/1609–3577–2015–1–58–61

УДК 621.315.592

О ПРИРОДЕ ТЕРМОАКЦЕПТОРОВ В ОБЛУЧЕННОМ ЭЛЕКТРОНАМИ ВЫСОКООМНОМ КРЕМНИИ

© 2015 г. С. П. Кобелева

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
Ленинский просп., д. 4, Москва, 119049, Россия

Дан анализ возможности участия глубоких акцепторных центров в кремнии в формировании наблюдавшегося экспериментально в ряде работ термоакцепторного эффекта, который заключается в смене типа электропроводности с электронного на дырочный при отжигах после облучения электронами или нейтронами высокоомного кремния. На основе решения уравнения электронейтральности в компенсированном монокристаллическом кремнии проведена оценка концентрации глубоких акцепторных центров, необходимых для получения дырочного типа электропроводности в зависимости от энергии ионизации акцептора и концентрации мелкой донорной примеси. Показано, что в термоакцепторный эффект в высокоомном электронном кремнии, полученном методом бестигельной зонной плавки, существенный вклад могут вносить глубокие акцепторные центры (с энергией ионизации ниже 0,4 эВ). Концентрации глубоких акцепторов, необходимые для перекомпенсации образца с небольшой исходной концентрацией доноров (10^{12} – 10^{13} см $^{-3}$), составляют порядка 10^{12} – 10^{14} см $^{-3}$ и, по-видимому, вполне достижимы. Роль таких центров могут играть комплексы дивакансия—примесь (Fe, P) с энергией ионизации до 0,34 эВ. При этом термическая активация межузельного бора также не исключена.

Ключевые слова: БЗП–кремний, термоакцепторы, облучение электронами, радиационно–технологические процессы, глубокие акцепторные центры.

Введение

Радиационные технологические процессы эффективно используют для улучшения характеристик полупроводниковых приборов и интегральных схем [1–4]. При облучении высокоэнергетичными электронами удельное электрическое сопротивление (**УЭС**) кремния стремиться к собственному значению, т. е. резко растет, что способствует улучшению характеристик силовых полупроводниковых приборов. При этом рекомбинационное время жизни τ свободных носителей заряда (**СНЗ**) уменьшается, что позволяет эффективно управлять высокочастотными характеристиками приборов на основе кремния. При отжигах после облучения радиационные дефекты (**РД**), закрепляющие уровень Ферми у середины запрещенной зоны, отжигаются при более низких температурах, чем **РД**, являющиеся эффективными рекомбинационными центрами **СНЗ** [5]. В работе [6] было обнаружено, что в высокоомном (200–800 Ом·см) кремнии n -типа

проводимости после облучения высокоэнергетичными электронами в интервале температур отжига 250–500 °С формируется достаточно большое число акцепторов (термоакцепторов — **ТА**), и материал становится дырочным. Максимальная концентрация дырок при комнатной температуре в наиболее высокоомном материале достигала значения 10^{14} см $^{-3}$. Перекомпенсацию и смену типа проводимости после отжигов облученного кремния, выращенного методом бестигельной зонной плавки (**БЗП**), отмечали и авторы работы [5]. В работе [6] было высказано предположение, что наблюдаемые **ТА** — это атомы бора, которые из междоузлий переходят в имеющиеся в большом количестве вакансии и становятся электрически активными. Таким образом, было предположено, что в высокоомном **БЗП**–кремнии с эффективной концентрацией фосфора на уровне 10^{13} см $^{-3}$ имеется не активный (межузельный) бор в концентрации, превышающей 10^{14} см $^{-3}$. Вместе с тем, имеется большое число работ, в которых в

Кобелева Светлана Петровна — кандидат физ.–мат. наук, старший научный сотрудник, доцент, e-mail: kob@misis.ru.

кремнии, отожженном после облучения электронами, наблюдается формирование вторичных акцепторных дефектов именно в интервале температур 200—400 °C [7—14]. К ним можно отнести акцепторные центры фосфор—дивакансия (PV_2)⁻ ($E_1 = E_v + 0,34$ эВ), кислород—дивакансия (V_2O)⁻ ($E_2 = E_c - 0,5$ эВ) [7—8], медьсодержащие центры [9], центры железо—дивакансия FeV_2 ($E_v + 0,184$ эВ) [10]. Отмечена особая роль многозарядных мультивакансионных центров [11—15]. Если суммарно концентрация глубоких акцепторов превысит концентрацию доноров, что может иметь место в высокоомном исходном материале, то эти центры будут заполняться в том числе и электронами из валентной зоны, т. е. создавать достаточную для смены типа проводимости концентрацию дырок.

Цель работы — оценка концентрации глубоких акцепторных центров N_A , необходимых для смены типа проводимости материала с электронного на дырочный, в зависимости от их энергии ионизации ΔE_A и концентрации мелких доноров N_D , для выяснения возможности наблюдения термоакцепторного эффекта с участием глубоких акцепторов, образующихся в результате радиационных технологических процессов.

Расчет концентрации дырок для невырожденного монокристаллического кремния

Расчеты концентрации электронов n и дырок p при комнатной температуре проводили на основе решения уравнения электронейтральности с учетом полностью ионизированных мелких доноров и одного заряженного акцептора в невырожденном полупроводнике. Уравнение электронейтральности (1) решали относительно полной концентрации акцепторов N_A :

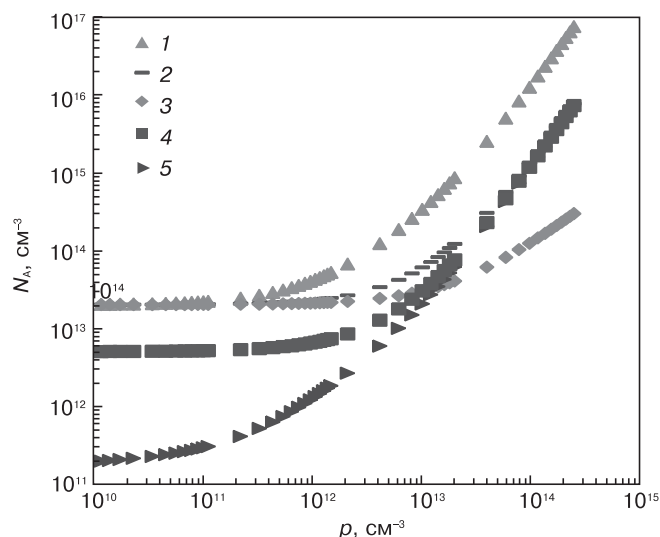
$$\frac{n_i^2}{p} + \frac{N_A}{2 \frac{p}{N_v} e^{\frac{\Delta E_A}{kT}} + 1} = p + N_D, \quad (1)$$

$$N_A = \left(p - \frac{n_i^2}{p} + N_D \right) \left(\frac{2p}{N_v} e^{\frac{\Delta E_A}{kT}} + 1 \right), \quad (2)$$

где n_i — собственная концентрация носителей заряда; $\Delta E_A = E_A - E_v$; N_v — плотность состояний на потолке валентной зоны; k — константа Больцмана; T — температура.

Концентрацию доноров в исходном материале изменяли от $2 \cdot 10^{12}$ до $5 \cdot 10^{13}$ см⁻³ (УЭС — от 2000 до 80 Ом·см).

Типичные зависимости p от N_A для $N_D = 2 \times 10^{13}$ см⁻³ (значение концентрации электронов взято из работы [6]) представлены на рисунке (кривые 1—4). На рисунке также приведены результаты расчета для акцепторного центра PV_2 ($\Delta E_A = 0,34$ эВ)



Зависимости концентрации дырок от концентрации акцепторов для различных значений концентраций мелких доноров N_D , см⁻³:

1, 2, 3 — $2 \cdot 10^{13}$; 4 — $2 \cdot 10^{12}$; 5 — $2 \cdot 10^{11}$ (ΔE_A , эВ: 1 — 0,4; 2, 4, 5 — 0,34; 3 — 0,18)

Hole Concentration as a Function of Acceptor Concentration for Different Shallow Donor Concentrations N_D , cm⁻³: (1, 2, 3) $2 \cdot 10^{13}$; (4) $2 \cdot 10^{12}$; (5) $2 \cdot 10^{11}$ (ΔE_A , eV: (1) 0,4; (2, 4, 5) 0,34; (3) 0,18)

при концентрации доноров $2 \cdot 10^{12}$ см⁻³ (кривая 5). Для получения концентрации дырок порядка 10^{14} см⁻³ достаточно такой же концентрации акцепторных центров с энергией ионизации 0,18 эВ, на порядок больше для центров с энергией ионизации 0,34 эВ и на два порядка больше для центров с энергией ионизации 0,4 эВ. Поэтому достаточно реалистичными кандидатами на роль термоакцепторов являются центры с участием дивакансий: фосфор—дивакансия ($\Delta E_A = 0,34$ эВ) или железо—дивакансия ($\Delta E_A = 0,18$ эВ). На этом участке зависимости концентрация доноров практически не влияет на результаты в силу ее сравнительной малости. Если в материале присутствуют также и мелкие акцепторы, в частности бор на месте кремния, необходимая для перекompенсации концентрация глубоких акцепторов уменьшается. Если одним из образующихся при отжиге акцепторных центров является комплекс фосфор—дивакансия, то эффективная концентрация доноров может заметно уменьшаться, что облегчает появление p -типа проводимости (см. рисунок, кривая 5).

Интересным представляется участок с концентрацией акцепторов от собственной до $(3—5) \times 10^{12}$ см⁻³ (см. рисунок). На нем вне зависимости от глубины расположения акцептора и концентрации мелкого донора концентрация дырок изменяется значительно при очень малых (единицы процентов) изменениях концентрации акцепторных центров. При этом колебания УЭС будут также значительны — от единиц до сотен кОм·см. Похожую ситуацию наблюдали в работе [5] на высокоомном (порядка 2 кОм·см) БЗП-кремнии, облученном электронами с энергией 6 МэВ и дозой 10^{15} см⁻². На пластине диа-

метром 60 мм измеряли карты УЭС (49 точек). После радиационных технологических процессов и последовательных отжига при температурах 400–500 °С на пластине появились высокоомные области p -типа проводимости с большим разбросом УЭС.

Заключение

На основе расчетов концентрации дырок при наличии в облученном кремнии мелкого донора (предположительно фосфора) и глубокого акцептора, в состав которого входят РД, показано, что в высокоомном кремнии в результате образования при отжигах вторичных акцепторных комплексов с участием РД может наблюдаться смена типа проводимости. При увеличении глубины залегания акцепторного центра от 0,2 до 0,4 эВ требуемая для этого концентрация 10^{12} – 10^{14} см⁻³ реально достижима, т. е. привлечение для объяснения смены типа проводимости только мелких акцепторов необязательно. В целом в ходе радиационных технологических процессов могут формироваться различные типы термоакцепторов: как комплексы дивакансия—примесь, так и термоактивированный из межузельного положения в узлы решетки бор. Поэтому итоговая концентрация дырок будет в значительной степени зависеть от примесного состава исходного материала.

Библиографический список

1. Ладыгин, Е. А. Основы лучевой радиационной технологии микроэлектроники / Е. А. Ладыгин, А. В. Паничкин, А. М. Мусалитин, М. П. Коновалов. – М.: МИСиС, 2003.
2. Ладыгин, Е. А. Повышение быстродействия и радиационной стойкости силовых кремниевых диодов с применением радиационного технологического процесса / Е. А. Ладыгин, М. П. Коновалов, М. Н. Орлова, М. В. Ручкин, П. Б. Лагов, А. М. Сурма // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика радиационного воздействия на радиоэлектронную аппаратуру. – 2006. – № 1/2. – С. 29–37.
3. Абдуллаев, О. Р. Влияние радиационной обработки быстрыми электронами на кремниевые высокочастотные p – i – n -диоды с барьерами Шоттки / О. Р. Абдуллаев, А. С. Дремин, П. Б. Лагов, М. Ю. Филатов // Наукоемкие технологии. – 2013. – Т. 14, № 11. – С. 51–56.
4. Ali, A. Influence of deep level defects on the performance of crystalline silicon solar cells: Experimental and simulation study / A. Ali, T. Gouveas, M. A. Hasan, H. S. Zaidi, M. Asghar // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. – 2011. – V. 95, N 10. – P. 2805–2810.
5. Анфимов, И. М. Пространственная неоднородность энергии активации отжига радиационных дефектов в БЗП кремнии / И. М. Анфимов, С. П. Кобелева, Ю. В. Осипов, О. В. Торопова, В. Е. Хабазин, В. В. Калинин // Изв. вузов. Материалы электрон. техники. – 2009. – № 3. – С. 20–22.
6. Стась, В. Ф. Термоакцепторы в облученном кремнии / В. Ф. Стась, И. В. Антонова, Е. П. Неустроев, В. П. Попов, Л. С. Смирнов // ФТП. – 2000. – Т. 34. – С. 162–167.
7. Пагава, Т. А. Влияние зарядового состояния неравновесных вакансий на природу радиационных дефектов в кристаллах n -Si / Т. А. Пагава // ФТП. – 2006. – Т. 40, № 8. – С. 919–921.
8. Пагава, Т. А. Влияние температуры облучения на эффективность введения мультивакансионных дефектов в кристаллах n -Si / Т. А. Пагава // ФТП. – 2005. – Т. 39, № 4. – С. 424–425.
9. Yarykin, N. Copper-related deep-level centers in irradiated p -type silicon / N. Yarykin, J. Weber // Phys. Rev. B. – 2011. – V. 83, N 12. – P. 125207.
10. Комаров, Б. А. Особенности отжига радиационных дефектов в кремниевых p – n -структурах: роль примесных атомов железа / Б. А. Комаров // ФТП. – 2004. – Т. 38, № 9. – С. 1079–1083.
11. Markevich, V. P. Donor levels of the divacancy-oxygen defect in silicon / V. P. Markevich, A. R. Peaker, B. Hamilton, S. B. Lastovskii, L. I. Murin // J. Appl. Phys. – 2014. – V. 115, iss. 1. – P. 012004.
12. Coutinho, J. Electronic and dynamical properties of the silicon trivacancy / J. Coutinho, V. P. Markevich, A. R. Peaker, B. Hamilton, S. B. Lastovskii, L. I. Murin, B. G. Svensson, M. J. Rayson, P. R. Briddon // Phys. Rev. B. – 2012. – V. 86, iss. 17. – P. 174101.
13. Markevich, V. P. Trivacancy and trivacancy-oxygen complexes in silicon: Experiments and *ab initio* modeling / V. P. Markevich, A. R. Peaker, S. B. Lastovskii, L. I. Murin, J. Coutinho, V. J. B. Torres, P. R. Briddon, L. Dobaczewski, E. V. Monakhov, B. G. Svensson // Phys. Rev. B. – 2009. – V. 80, iss. 23. – P. 235207.
14. Markevich, V. P. Structure and electronic properties of trivacancy and trivacancy-oxygen complexes in silicon / V. P. Markevich, A. R. Peaker, B. Hamilton, S. B. Lastovskii, L. I. Murin, J. Coutinho, V. J. B. Torres, L. Dobaczewski, B. G. Svensson // Phys. status solidi. A. – 2011. – V. 208, iss. 3. – P. 568–571.
15. Ganagana, N. Formation of donor and acceptor states of the divacancy-oxygen centre in p -type Cz-silicon / N. Ganagana, B. Raissi, L. Vines, E. V. Monakhov, B. G. Svensson // J. Phys.: Condens. Matter. – 2012. – V. 24, N 43. – P. 435801.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ по программе повышения конкурентоспособности НИТУ «МИСиС» среди ведущих мировых научно-образовательных центров на 2013–2020 г.г. (№ К2–2014–055).

Статья поступила в редакцию 30 января 2015 г.

ISSN 1609–3577 Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2015, vol. 18, no. 1, pp. 58–61.

The Nature of Thermal Acceptors in Electron Irradiated High Resistivity Silicon

Svetlana Petrovna Kobleva — Cand. Sci. (Phys.–Math.), Senior Researcher, Associate Professor (kob@misys.ru).

National University of Science and Technology «MISiS»,
4 Leninskiy prospekt, Moscow 119049, Russia

Abstract. This work is an analysis of the possible role of deep acceptor centers in silicon in the formation of the experimentally observed thermal acceptor effect consisting in the change from n to p conductivity type after annealing of electron or neutron irradiated high resistivity silicon. Based on the solution of the electrical negativity equation

for compensated silicon we have estimated the dependence of the concentration of deep acceptor centers that is required for changing to p -type conductivity on acceptor energy level and shallow donor concentration.

We show that deep acceptor centers can make a significant contribution to the thermal acceptor effect in high resistivity silicon (energy levels of up to 0.4 eV). The concentrations of deep acceptor centers required for changing the conductivity type are of the order of 10^{12} – 10^{14} cm⁻³. These concentrations seem to be achievable in samples containing low shallow donor concentrations (10^{12} – 10^{13} cm⁻³). Such centers can be divacancy–impurity complexes (Fe, P) with ionization

energies of up to 0.34 eV. The thermal activation of interstitial boron is not excluded either.

Key words: FZ silicon, thermal acceptors, electron irradiation, irradiation processes, deep acceptor centers

References

1. Ladigin E. A., Panichkin A. V., Musalitin A. M., Konovalov M. P. *Osnovi luchevoy radiacionnoy technologii microelektroniki* [Radiation technologies in microelectronics]. Moscow: MISiS, 2003. (In Russ.)
2. Ladigin E. A., Konovalov M. P., Orlova M. N., Ruchkin M. V., Lagov P. B., Surma A. M. Power silicon diodes speed and radiation stability increasing on the base of radiation technology. *Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Seriya: Fizika radiatsionnogo vozdeistviya na radioelektronnyy apparaturu = Questions of atomic science and technics. Series: Physics of radiation effects on radio-electronic equipment*. 2006, no. 1–2, pp. 29–37. (In Russ.)
3. Abdullaev O. R., Drenin A. S., Lagov P. B., Filatov M. Y. The Effects of Exposure to Fast Electron Radiation on High-Frequency Si PIN diodes and Schottky Barrier Diodes. *Naukoemkie tekhnologii = Science Intensive Technologies*. 2013, vol. 14, no. 11, pp. 51–56. (In Russ.)
4. Ali A., Gouveas T., Hasan M. A., Zaidi H. S., Asghar M. Influence of deep level defects on the performance of crystalline silicon solar cells: Experimental and simulation study. *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 2011, vol. 95, no. 10, pp. 2805–2810. DOI: 10.1016/j.solmat.2011.05.032
5. Anfimov I. M., Kobeleva S. P., Osipov Y. V., Toropova O. V., Khabazin V. E., Kalinin V. V. Spatial inhomogeneity of radiation defect annealing activation energy in FZ silicon. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2009, no. 3, pp. 20–22. (In Russ.)
6. Stas' V. F., Antonova I. V., Neustroev E. P., Popov V. P., Smirnov L. S. Thermal acceptors in irradiated silicon. *Semiconductors*. 2000, vol. 34, no. 2, pp. 155–160. DOI: 10.1134/1.1187925
7. Pagava T. A. Effect of irradiation temperature on the efficiency of introduction of multivacancy defects into *n*-Si crystals. *Semiconductors*. 2006, vol. 40, no. 8, pp. 919–921. DOI: 10.1134/S1063782606080057
8. Pagava T. A. The effect of the charge state of nonequilibrium vacancies on the nature of radiation defects in *n*-Si crystal. *Semiconductors*. 2005, vol. 39, no. 4, pp. 400–401. DOI: 10.1134/1.1900251
9. Yarykin N., Weber J. Copper-related deep-level centers in irradiated *p*-type silicon. *Phys. Rev. B*. 2011, vol. 83, no. 12, p. 125207. DOI: 10.1103/PhysRevB.83.125207
10. Komarov B. A. Special features of radiation-defect annealing in silicon *p*–*n*-structures: The role of Fe impurity atoms. *Semiconductors*. 2004, vol. 38, no. 9, pp. 1041–1046. DOI: 10.1134/1.1797482
11. Markevich V. P., Peaker A. R., Hamilton B., Lastovskii S. B., Murin L. I. Donor levels of the divacancy–oxygen defect in silicon. *J. Appl. Phys.* 2014, vol. 115, iss. 1, p. 012004. DOI: 10.1063/1.4837995
12. Coutinho J., Markevich V. P., Peaker A. R., Hamilton B., Lastovskii S. B., Murin L. I., Svensson B. G., Rayson M. J., Briddon P. R. Electronic and dynamical properties of the silicon trivacancy. *Phys. Rev. B*. 2012, vol. 86, iss. 17, p. 174101. DOI: 10.1103/PhysRevB.86.174101
13. Markevich V. P., Peaker A. R., Lastovskii S. B., Murin L. I., Coutinho J., Torres V. J. B., Briddon P. R., Dobaczewski L., Monakhov E. V., Svensson B. G. Trivacancy and trivacancy–oxygen complexes in silicon: Experiments and *ab initio* modeling. *Phys. Rev. B*. 2009, vol. 80, iss. 23, p. 235207. DOI: 10.1103/PhysRevB.80.235207
14. Markevich V. P., Peaker A. R., Hamilton B., Lastovskii S. B., Murin L. I., Coutinho J., Torres V. J. B., Dobaczewski L., Svensson B. G. Structure and electronic properties of trivacancy and trivacancy–oxygen complexes in silicon. *Phys. status solidi. A*. 2011, vol. 208, iss. 3, pp. 568–571. DOI: 10.1002/pssa.201000265
15. Ganagana N., Raeissi B., Vines L., Monakhov E. V., Svensson B. G. Formation of donor and acceptor states of the divacancy–oxygen centre in *p*-type Cz–silicon. *J. Phys.: Condensed Matter*. 2012, vol. 24, no. 43, p. 435801. DOI: 10.1088/0953-8984/24/43/435801

Acknowledgements. This work was performed with financial support from the Ministry of Education and Science of the Russian Federation under the Program for the development of National Research and Technical University MISiS competitiveness among leading international research and education centers for 2013–2020 (No. K2–2014–055).

Received January 30, 2015

МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИЯ. МАГНИТНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

MATERIALS SCIENCE AND TECHNOLOGY. MAGNETIC MATERIALS

Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2015. Т. 18, № 1. С. 62–68.
ISSN 1609–3577. DOI: 10.17073/1609–3577–2015–1–62–68

УДК 621.318

Методом конверсионной электронной мессбауэровской спектроскопии исследованы магнитные и электрические сверхтонкие взаимодействия в приповерхностных слоях эпитаксиальной пленки железоиттриевого граната ориентации (111), выращенной методом жидкофазной эпитаксии. Установлен факт нарушения стехиометрии анионной подрешетки приповерхностных слоев ($\approx 8 \cdot 10^{-8}$ м) эпитаксиальной пленки железоиттриевого граната и, как следствие, формирование двух типов d -позиций, что связано со значительной концентрацией точечных дефектов в анионной подрешетке в приповерхностной зоне и ростом степени ковалентности химической связи в переходном слое «пленка—воздух». Это также обуславливает наличие зафиксированной дублетной компоненты, которая соответствует ионам железа в парамагнитном состоянии с промежуточной степенью валентности от +2 до +3. Показано, что применение метода диагонализации гамильтониана смешанных квадратурных и магнитных взаимодействий для интерпретации спектра открыло возможность построения векторной диаграммы пространственной ориентации эффективных магнитных полей на ядрах Fe^{57} , вследствие чего восстановлен механизм формирования вектора результирующего магнитного момента эпитаксиальной пленки железоиттриевого граната. Зафиксирована незначительная неколлинеарность магнитных моментов в a - и d -позициях железа, которая составляет $\approx 4^\circ$. Получены результаты, которые дополняют экспериментальную базу для формирования целостной картины магнитных и электрических сверхтонких взаимодействий в эпитаксиальных ферит–гранатовых пленках, и их необходимо учитывать при практическом использовании магнитных свойств таких материалов.

Ключевые слова: железоиттриевый гранат, жидкофазная эпитаксия, мессбауэровская спектроскопия, сверхтонкие взаимодействия, магнитная микроструктура, эффективное магнитное поле, магнитный момент.

ИССЛЕДОВАНИЯ МАГНИТНЫХ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВЕРХТОНКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В ЭПИТАКСИАЛЬНОЙ ПЛЕНКЕ ЖЕЛЕЗОИТТРИЕВОГО ГРАНАТА МЕТОДОМ КОНВЕРСИОННОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

© 2015 г. В. В. Мокляк

Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,
бульв. акад. Вернадского, д. 36, 03680, Киев, Украина

Введение

Базовую основу всех феррогранатов составляет железоиттриевый гранат (ЖИГ), так как наличие трех связанных антиферромагнитным взаимодействием катионных подрешеток разных размеров позволяет в широких границах изменять химический состав путем замещения. Это одновременно с вариацией условиями роста открывает возможность создания магнитной микро- и макроструктуры необходимого типа с заданными значениями намагниченности насыщения, константы одноосевой анизотропии и параметров затухания магнитостатических волн. При использовании эпитаксиальных пленок ферро-

гранатов определяющими являются свойства не всего объема, а тонкого приповерхностного слоя. Формирование кристаллической структуры эпитаксиальных пленок феррогранатов во время процесса жидкофазной эпитаксии (ЖФЭ) отличается определенными особенностями по сравнению с процессом роста монокристаллов. Надо учитывать существование переходных слоев пленка—воздух и пленка—подложка, толщина которых соизмерима с толщиной однородной части пленки и вносит существенный вклад в свойства эпитаксиальной гетероструктуры. Это вызывает необходимость детального изучения особенностей формирования кристаллической и, следовательно, магнитной микро-

Мокляк Владимир Владимирович — старший научный сотрудник лаборатории физики магнитных пленок (23), e-mail: mvvmcv@mail.ru.

структур подобных слоев на этапах эпитаксиального выращивания, а также поиска путей целенаправленного изменения их магнитных свойств. Последнее является чрезвычайно важной проблемой с точки зрения использования данных материалов на практике, поскольку применяются они в первую очередь как магнетики.

Цель работы — исследование особенностей формирования магнитной микроstructures в эпитаксиальных пленках ЖИГ и изучение механизма формирования вектора результирующего магнитного момента эпитаксиальной гетероструктуры с помощью метода конверсионной электронной мессбауэровской спектроскопии (КЭМС).

Особенности магнитной микроstructures приповерхностных слоев эпитаксиальной пленки железоиттриевых гранатов

Для исследования формирования магнитной микроstructures антиферромагнетиков ЖИГ является удобным модельным объектом. Основную роль в этом случае играют ионы Fe^{3+} , которые находятся в тетраэдрических и октаэдрических позициях. Магнитное упорядочение возникает вследствие косвенного обменного взаимодействия между ионами Fe^{3+} через промежуточный анион кислорода [1]. Векторы магнитных моментов ионов в a - и d -позициях $\mathbf{M}_a$ и $\mathbf{M}_d$ ориентируются антипараллельно [2], что и приводит к возникновению антиферромагнитной структуры и, как следствие, обуславливает наличие нескомпенсированного магнитного момента. Для эпитаксиальных монокристаллических пленок с плоскостью сечения (111) за счет эффекта размагничивания поверхности ферромагнитного образца [1] характерно возникновение дополнительной планарной составляющей намагниченности вследствие наличия смешанной кубической и одноосной анизотропии. Для такого типа анизотропии формируется ориентация намагниченности типа «легкая ось в плоскости» [3], т. е. вектор результирующего магнитного момента отклоняется от оси [111] в направлении плоскости пленки.

Образцы и методы исследования

Для исследования магнитной микроstructures приповерхностных слоев эпитаксиальной пленки ЖИГ и восстановления информации о пространственной ориентации магнитных моментов ионов железа в структуре граната применяли метод КЭМС [4], который позволяет определить параметры электрических и магнитных сверхтонких взаимодействий на меченом ядре (в нашем случае Fe^{57}) и получить данные о его ближнем окружении. Спектры получены в режиме постоянных ускорений с помощью промышленного мессбауэровского спектрометра ЯГРС-4М и многоканального анализатора импульсов УНО-4096-90, который работал в режиме «временного

анализа». Для регистрации электронов конверсии использовали пропорциональный газовый счетчик, работающий на смеси 96 % He + 4 % CH_4 . Источником квантов служил Co^{57} активностью 100 мКю в хромовой матрице. Калибровку КЭМ-спектров проводили относительно металлического $\alpha\text{-Fe}$, нелинейность в системе движения спектрометра не превышала 0,5 %, а полуширина линии на нитропрусида натрия составляла 0,28 мм/с.

Для эксперимента использовали пленку ЖИГ, выращенную методом ЖФЭ на немагнитной подложке из гадолиний-галлиевого граната (ГГГ) с плоскостью сечения (111). Скорость роста пленки W составляла $8 \cdot 10^{-9}$ м/с, температура насыщения раствора-расплава T_S — 1270 К, температура роста пленки T_G — 1256 К, толщина пленки $h_{\text{пл}}$ — $2,85 \times 10^{-6}$ м. Значения молярных коэффициентов Бленка — Нильсена составили: $R_1 = 30,3$, $R_3 = 15,6$, $R_4 = 0,138$. Для увеличения вероятности резонансного рассеяния γ -квантов оксид железа в исходной шихте обогащали изотопом Fe^{57} до 14 % (ат.)

Применение метода диагонализации гамильтониана смешанных квадрупольных и магнитных взаимодействий для интерпретации КЭМ-спектра эпитаксиальной пленки ЖИГ

Ферримагнитное упорядочение в структуре феррогранатов устанавливается в результате воздействия на ядра Fe^{57} взаимодействующих электростатических полей ионов решетки с собственными электронными оболочками ядер. В случае ЖИГ одновременно существуют два вида взаимодействий примерно равных интенсивностей: электрическое квадрупольное и магнитное дипольное, т. е. выполняется следующее условие: $|e^2 Q V_{zz}| \approx |\mu H_{\text{эфф}}|$, где e — заряд электрона; Q — квадрупольный момент ядра; V_{zz} — аксиальная компонента градиента электрического поля (ГЭП) на ядре; μ — магнитный момент ядра; $H_{\text{эфф}}$ — эффективное магнитное поле на резонансном ядре. В этом случае упрощенные уравнения типа [5] для определения уровней сверхтонкой структуры ядра неприменимы. Поэтому моделирование мессбауэровского спектра осуществляли с помощью гамильтониана смешанного электрического квадрупольного и магнитного дипольного взаимодействий. Применяли методический подход, предложенный в работе [6]: диагонализировав гамильтониан сверхтонкого взаимодействия, устанавливали позиции γ -резонансных линий парциальных секстетов в форме комбинаций лоренциан. В процессе аппроксимации применяли следующие переменные: изомерный сдвиг I_S , $H_{\text{эфф}}$, V_{zz} , полярный угол β ориентации $\mathbf{H}_{\text{эфф}}$ относительно $\mathbf{V}_{zz}$ и ширину ω абсорбционных линий. Единичные векторы $\mathbf{e}_z$ введенных лабораторных систем координат направлены вдоль направлений ГЭП соответствующих кристаллографических позиций (рис. 1). Поскольку тетраэдрические позиции

обладают осью симметрии третьего порядка, а октаэдрические — четвертого, то, исходя из соображений кристаллической симметрии, считаем тензоры ГЭП на ядрах аксиально-симметричными, т. е. их компоненты должны удовлетворять условию $\eta = (V_{xx} - V_{yy})/V_{zz} = 0$.

Исходя из кристаллографических предпосылок экспериментальный КЭМ-спектр, полученный для данной пленки ЖИГ, должен состоять из трех парциальных составляющих (зеемановских секстетов):

- для ядер Fe^{57} в d -подрешетке с полярным углом между направлением ГЭП на ядре и направлением хода γ -лучей (ось $[111]$) $\theta_{1,2,3}^d = 54^\circ 44'$;
- для 1/4 части ядер Fe^{57} в a -подрешетке с углом $\theta_4^a = 0$ (направление ГЭП на ядре совпадает с направлением $[111]$);
- для 3/4 частей ядер Fe^{57} в a -подрешетке с соответствующим полярным углом $\theta_{5,6,7}^a = 70^\circ 32'$.

Следует отметить, что в подавляющем большинстве экспериментальных исследований этих материалов [5, 7—18] для интерпретации мессбауэровских спектров в основу заложена именно упомянутая выше модель. Хотя довольно часто это приводит к неполному согласованию экспериментального и модельного спектров, поскольку достичь должного соотношения 2 и 5 линий результирующего спектра в предположении только одной d -позиции невозможно. Для примера на рис. 2 приведено несколько классических способов интерпретации КЭМ-спектра эпитаксиальной пленки ЖИГ, которые были предложены в работе [12]. Выделенные на рис. 2 стрелками области указывают на основные различия и несовпадения предлагаемых теоретических моделей расшифровки и экспериментального КЭМ-спектра.

Поэтому для получения приемлемых результатов аппроксимации было высказано предположение о наличии двух магнитонезэквивалентных d -позиций с различными значениями и ориентациями эффективных магнитных полей на ядрах и незначительного количества ионов железа, которые формируют парамагнитный дублет (табл. 1, рис. 3).

Результаты и их обсуждение

Таким образом, полученный КЭМ-спектр был представлен с помощью следующей модели:

- секстеты « a_1 » и « a_2 », которые соответствуют ядрам Fe^{57} в октаэдрическом окружении с полярными углами $\theta_{5,6,7}^a = 70^\circ 32'$ и $\theta_4^a = 0^\circ$ соответственно;
- секстеты « d_1 » и « d_2 » полученные от ядер Fe^{57} в тетрапозициях с полярным углом $\theta_{1,2,3}^d = 54^\circ 44'$;
- парамагнитный дублет « D » ($\approx 2\%$).

Наличие двух вариантов ближнего окружения ионов железа в d -позиции может быть обусловлено нарушением стехиометрии анионной подрешетки и неконтролируемым входжением в гранатовую структуру примесных атомов из раствора-расплава на завершающих этапах эпитаксии. Известно [9, 18—20],

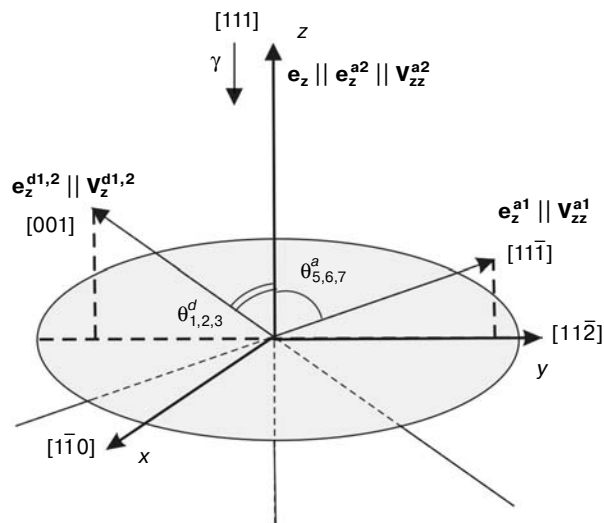


Рис. 1. Связь лабораторных полярных систем координат $\mathbf{e}_z^i$ с кристаллографическими направлениями исследуемого образца (плоскость сечения (111))

Fig. 1. Relationship of the laboratory polar coordinate system $\mathbf{e}_z^i$ with crystallographic directions of the test specimen (section plane (111))

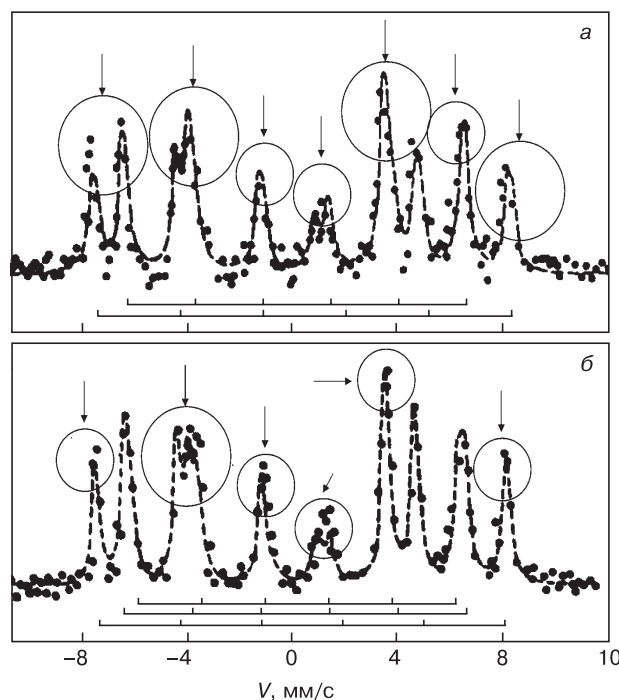


Рис. 2. Мессбауэровский спектр (точки) эпитаксиальной монокристаллической пленки ЖИГ и его представление (кривая), согласно работе [12]: а — модель из двух парциальных секстетов; б — трех.

Стрелками указано несоответствие модели и эксперимента

Fig. 2. Mössbauer spectrum of epitaxial single crystal YIG film and its representation according to [12]: the top model consists of two partial sextets and the bottom one, of three. The arrows indicate the discrepancy between the model and the experiment

что ионы свинца Pb^{2+} занимают додекаэдрические позиции, а ионы Pb^{4+} — октаэдрические позиции, вытесняя из них ионы Fe^{3+} [9, 18—20]. Второй неконтролируемой примесью являются ионы Pt^{4+} , которые занимают исключительно a -позиции, нарушая тем самым локальное окружение ионов Fe^{3+} в

Таблица 1

Основные параметры парциальных составляющих мессбауэровского спектра исследованной эпитаксиальной монокристаллической пленки железиттриевого граната
[Table 1. The main parameters of partial components of the Mössbauer spectrum of epitaxial single crystal YIG film]

Позиция железа	ω , мм/с	I_S , мм/с	Q_S , мм/с	V_{zz} , 10^{21} В/м ²	$H_{эфф}$, кЕ	β , угл. град.	S , %
a_1	0,36	0,62	—	0,6	497	5	29
a_2	0,36	0,61	—	1,6	481	90	9
d_1	0,43	0,35	—	3,4	406	-46	26
d_2	0,47	0,43	—	-7,1	387	-54	34
D	0,36	0,62	2,04	—	—	—	2

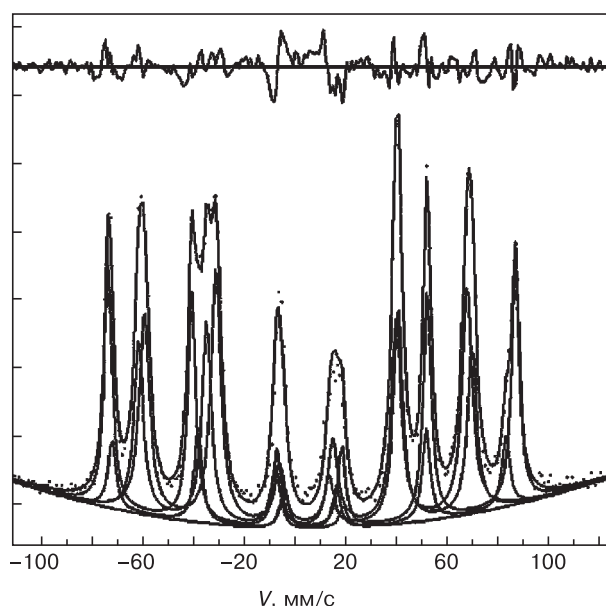


Рис. 3. Экспериментальный мессбауэровский спектр (точки) эпитаксиальной монокристаллической пленки ЖИГ, его модельное представление (кривая) и величина несоответствия (значение резонансного эффекта составляет 9,6 %)
Fig. 3. Experimental Mössbauer spectrum of epitaxial single crystal YIG film, its model representation and the value of discrepancy (the resonance effect magnitude is 9.6%)

кислородных тетраэдрах [18—20]. Согласно работам [4, 7], с приповерхностного слоя пленки толщиной $6,5 \times 10^{-8}$ м вылетает больше 2/3 конверсионных электронов. Низкоэнергетическая область амплитудного спектра (шумы, фотоэлектроны, конверсионные электроны с глубин $> 8,5\text{—}9,5 \cdot 10^{-8}$ м) обрезается аппаратно дискриминатором, и таким образом экспериментальный спектр формируется путем интегральной регистрации электронов конверсии с глубин $< 9 \cdot 10^{-8}$ м. Согласно работе [7], толщина переходного слоя, которая характеризуется катионной неоднородностью, составляет $< 8 \cdot 10^{-8}$ м. Катионное распределение переходного слоя во многом будет определяться технологическими условиями эпитаксии (см. выше), неравновесность которых обуславливает формирование приповерхностного слоя с концентрацией атомных дефектов $\leq 0,005$ на формульную единицу. Приведенные выше значения

дефектности подтверждаются отношением заселенности d - и a -позиций n_d/n_a , которое очень близко к отношению кристаллографических стехиометрических заселенностей: $n_d/n_a = (S_d/S_a)(f_d/f_a) \approx 1,51$ (при расчете отношение f_d/f_a принято равным $\approx 0,94$, согласно работе [9]).

Такие концентрации существенно не влияют на кристаллическое упорядочение, но даже незначительные искажения локального окружения вызывают значительные изменения сверхтонких взаимодействий на резонансном ядре. В табл. 2 приведены полученные, согласно результатам калибровок изомерных сдвигов [8], числовые значения доли 4s-электронов мессбауэровских атомов для выделенных позиций, которые вносят вклад в формирование результирующей плотности электронного заряда на меченом ядре.

Концентрации 4s-электронов для двух a -позиций и позиции d_2 практически совпадают с литературными данными [8]. Увеличение доли 4s-электронов для позиции d_1 очевидно следует связать с наличием анионных вакансий в исследуемом приповерхностном слое, о чем свидетельствуют данные работы [7]. Так, по данным вторичной ионной масс-спектрометрии, поверхностный слой толщиной $15 \cdot 10^{-8}$ м характеризуется дефицитом по кислороду

Таблица 2

Электронная конфигурация мессбауэровских атомов железа в структуре эпитаксиальной монокристаллической пленки железиттриевого граната

[Table 2. The electronic configuration of iron atoms in the structure of epitaxial single crystal YIG film]

Позиция железа	Доля 4s-электронов	Электронная конфигурация
a_1	0,01	$3d^5 4s^{0,01}$
a_2	0,01	$3d^5 4s^{0,01}$
d_1	0,08	$3d^5 4s^{0,08}$
d_2	0,05	$3d^5 4s^{0,05}$

примерно на 20 %. Обусловленное этим увеличение расстояния обменного взаимодействия в цепочке $\text{Fe}_a^{3+}-\text{O}^{2-}-\text{Fe}_d^{3+}$ и искажение симметрии локального окружения обуславливают уменьшение перекрытия электронных оболочек Fe^{3+} и O^{2-} , что приводит к увеличению вклада $4s$ -электронов в плотность электронного заряда на меченом ядре. Большая чувствительность d -позиции по отношению к кислородной нестехиометрии в данном случае, очевидно, обусловлена малым количеством ионов кислорода, которые ее формируют, по сравнению с a -позицией. О перестройке локального окружения для части ионов железа в тетраподрешетке свидетельствуют также различные знаки величины компоненты тензора ГЭП на резонансном ядре. Наличие спектра магнитонезэквивалентных позиций железа в тетраподрешетке подтверждает и уширение линий секстетов « d_1 » и « d_2 » на $\approx 0,07 \pm 0,11$ мм/с по сравнению с значениями полуширины линий для a -позиций. В исследуемых образцах обнаружено также нали-

чие дублетной компоненты, которая соответствует атомам железа в парамагнитном состоянии. Фиксация этой составляющей выходит за пределы погрешности примененных методов расшифровки и составляет ≈ 2 %. Значение квадрупольного расщепления дублета «D», равное $2,05 \pm 0,04$ мм/с, свидетельствует о снижении валентности ионов железа в приповерхностном слое с +3 до +2. Данный факт, очевидно, является прямым следствием формирования двух типов d -позиции, вследствие значительной концентрации точечных дефектов в анионной подрешетке в приповерхностной зоне и ростом степени ковалентности химической связи в переходном слое пленка—воздух. Наличие двухвалентного железа в приповерхностном слое пленки подтверждается значениями изомерного сдвига для парамагнитной компоненты. В совокупности все упомянутые выше факторы и приводят к необходимости трактовки экспериментального КЭМ-спектра с помощью приведенной на рис. 3 модели, где учитывается наличие двух кристаллических и, следовательно, магнитонезэквивалентных d -позиций и присутствует парамагнитная компонента.

Диаграмма пространственной ориентации направлений эффективных магнитных полей на ядрах Fe^{57} и соответствующих компонент тензоров ГЭП отдельных подрешеток представлена на рис. 4, а. Приведено сечение лабораторной плоскостью YOZ (см. рис. 1). В общем случае, согласно работе [3], следует учитывать наличие ориентационных фаз намагниченности В или С (табл. 3).

Известно [8], что эффективное магнитное поле на ядре иона железа и его магнитный момент антипараллельны между собой. Магнитные моменты железа в подрешетках

Таблица 3

Равновесные ориентационные состояния намагниченности в эпитаксиальной монокристаллической пленке железиттриевого граната
[Table 3. The equilibrium state of the magnetization orientation in epitaxial single crystal YIG film]

Фаза	Тип анизотропии	Полярный угол θ	Азимутальный угол φ	Количество ОЛН
В	Легкий конус	$0 < \theta < \pi/2$ $\pi/2 < \theta < \pi$	$-\pi/6+n2\pi/3$	3
С			$\pi/6+n2\pi/3$	
			$\pi/6+n2\pi/3$ $-\pi/6+n2\pi/3$	
Примечание. n — целое число; ОЛН — ось легкого намагничивания.				

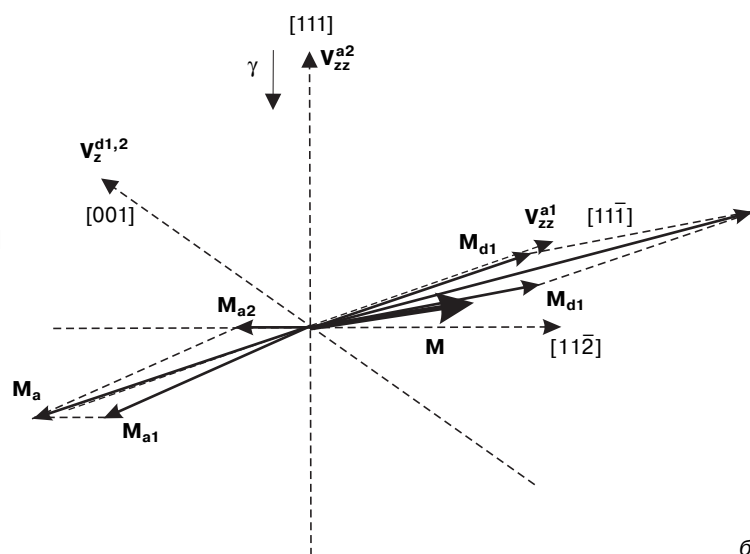
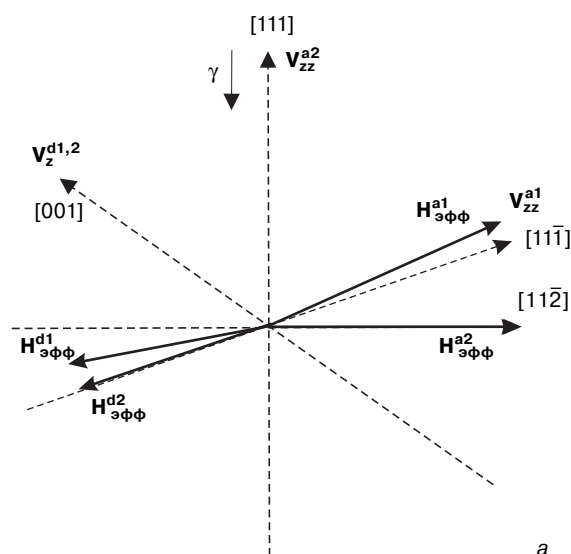


Рис. 4. Диаграмма ориентации направлений эффективных магнитных полей на ядрах Fe^{57} (а) и модельное представление процесса формирования результирующего вектора магнитного момента $\mathbf{M}$ (б) в эпитаксиальной пленке ЖИГ (сечение плоскостью YOZ) (см. рис. 1)

Fig. 4. Diagram showing orientation directions of the effective magnetic fields at the Fe^{57} nuclei (a) and the model representation of the formation of the resultant magnetic moment vector $\mathbf{M}$ (b) in epitaxial YIG film (section plane YOZ as shown in Fig. 1)

граната составляют $m_{24d} = 4,2\mu_B$ и $m_{16a} = -4,0\mu_B$ [1]. Это открывает возможность для восстановления пространственной ориентации магнитных моментов отдельных подрешеток и наглядного представления процесса формирования результирующего вектора магнитного момента **M** (рис. 4, б). Представленная модель основывается на предположении формирования магнитной микроструктуры в феррит-гранатовых пленках аналогично « $j\bar{j}$ »-связи в квантовой механике: сначала формируется магнитный момент цепочки $Fe^{3+}-O^{2-}-Fe_d^{3+}$, а затем происходит суммирование всех таких взаимодействий в структуре. Необходимо также отметить факт обнаружения незначительной неколлинеарности магнитных моментов *a*- и *d*-позиций железа, которая составляет $\approx 4^\circ$ и указывает на частичное нарушение антиферромагнитного упорядочения. Предложенная модель и полученные результаты хорошо коррелируют с данными работы [7], где было исследовано анизотропное поведение результирующего вектора магнитного момента **M** в плоскости и установлена периодичность магнитных свойств при повороте на угол $\tau = n60^\circ$ (где *n* — целое число).

Заключение

Методом КЭМС установлен факт нарушения стехиометрии анионной подрешетки приповерхностных слоев ($\approx 8 \cdot 10^{-8}$ м) эпитаксиальной пленки ЖИГ, выращенной методом ЖФЭ, о чем свидетельствуют наличие в спектре дополнительного секстиплета от магнитонезэквивалентной *d*-позиции ионов железа и дублетная компонента, которая соответствует ионам железа в парамагнитном состоянии с промежуточной степенью валентности от +2 до +3. С применением метода диагонализации гамильтониана смешанных квадрупольных и магнитных взаимодействий для интерпретации КЭМ-спектра построена векторная диаграмма пространственной ориентации эффективных магнитных полей на ядрах Fe^{57} и восстановлен механизм формирования вектора результирующего магнитного момента эпитаксиальной пленки ЖИГ. Обнаружена незначительная неколлинеарность магнитных моментов в *a*- и *d*-позициях железа, которая составляет $\approx 4^\circ$.

Библиографический список

1. Вонсовский, С. В. Магнетизм / С. В. Вонсовский. — М.: Наука, 1971. — 1032 с.
2. Гуденаф, Д. Магнетизм и химическая связь / Д. Гуденаф. — М.: Металлургия, 1963. — 325 с.
3. Ubizskii, S. B. Orientation states of magnetisation in epitaxial (111)-oriented iron garnet films / S. B. Ubizskii // J. Magn. and Magn. Mater. — 1999. — V. 195. — P. 575—582.
4. Белозерский, Г. Н. Мессбауэровская спектроскопия как метод исследования поверхности / Г. Н. Белозерский. — М.: Энергоиздат, 1990. — 352 с.
5. Башкиров, Ш. Ш. Локальные магнитные поля на ядрах железа в иттриевом феррите-гранате, индуцированные внешним магнитным полем / Ш. Ш. Башкиров, Н. Г. Ивойлов, А. А. Монахов, В. А. Чистяков // ФТТ. — 1973. — Т. 15, № 4. — С. 1058—1061.
6. Серегин, П. П. Физические основы мессбауэровской спектроскопии / П. П. Серегин. — СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2002. — 169 с.
7. Остафийчук, Б. К. Мессбауэровские исследования монокристаллических пленок железоиттриевого граната во внешнем магнитном поле / Б. К. Остафийчук, В. М. Ткачук, О. М. Ткачук, В. Д. Федорив // Металлофизика и новейшие технологии. — 2000. — Т. 22, № 11 — С. 11—16.
8. Гольдманский, В. И. Химические применения мессбауэровской спектроскопии / В. И. Гольдманский. — М.: Мир, 1970. — 502 с.
9. Камзин, А. С. Мессбауэровские исследования свойств поверхности и объема пленок замещенных ферритов-гранатов в области точки Кюри / А. С. Камзин, Ю. Н. Мальцев // ФТТ. — 1997. — Т. 39, № 8. — С. 1410—1414.
10. Mahdi, S. Mossbauer spectroscopy study of substituted yttrium iron garnets / S. Mahdi, D. Abed-Fatah // Solid State Comm. — 1996. — V. 97. — P. 471—476.
11. Greneche, J. M. Spin reorientation in substituted iron garnets investigated by Mossbauer spectrometry / J. M. Greneche, H. Pascard // J. Magn. and Magn. Mater. — 1995. — V. 147 — P. 115—121.
12. Остафийчук, Б. К. Кристаллическая и магнитная структура имплантированных слоев монокристаллических пленок железоиттриевого граната / Б. К. Остафийчук, В. А. Олейник, В. М. Пыльшив, Б. Т. Семен, Л. М. Смеркло, Б. И. Яворский, В. И. Кравец, И. В. Коваль. — Киев: Ин-т металлофизики, 1991. — 70 с. (препр. АН УССР).
13. Alff, C. Hyperfine structure of Fe^{57} in yttrium-iron garnet from the Mossbauer effect / C. Alff, G. K. Wertheim // Phys. Rev. B. — 1961. — V. 122, N 5. — P. 1414—1417.
14. Housley, R. M. Electrostatic forces, molecular-orbital theory and the electric field gradient in yttrium iron garnet / R. M. Housley, R. W. Grant // Phys. Rev. B. — 1972. — V. 29, N 4. — P. 203—206.
15. Kostishyn, V. G. Mössbauer conversive spectroscopy of radiation defects in gamma-irradiated magnetic garnets / V. G. Kostishyn, L. M. Letyuk, M. N. Shipko, V. D. Fedoriv // J. Magn. and Magn. Mater. — 1996. — V. 160. — P. 361—362.
16. Башкиров, Ш. Ш. Конверсионные мессбауэровские исследования эпитаксиальных пленок смешанных ферритов-гранатов / Ш. Ш. Башкиров, Н. Г. Ивойлов, Е. С. Романов, А. П. Кирменский // ФТТ. — 1982. — Т. 24, № 9. — С. 2641—2647.
17. Камзин, А. С. Исследования распределения катионов в поверхностном слое и объеме пленок замещенных ферритов-гранатов / А. С. Камзин, Ю. Н. Мальцев // ФТТ. — 1997. — Т. 39, № 7. — С. 1248—1252.
18. Костишин, В. Г. Влияние температуры роста на структуру и некоторые свойства эпитаксиальных пленок $Y_3Fe_5O_{12}$ / В. Г. Костишин, В. В. Медведь, Л. М. Летюк // Неорганические материалы. — 1999. — Т. 35, № 2. — С. 222—226.
19. Костишин, В. Г. Мессбауэровская спектроскопия и некоторые оптические свойства эпитаксиальных пленок $Y_3Fe_5O_{12}$ с различным содержанием ионов Pb / В. Г. Костишин, В. В. Медведь, Л. М. Летюк, М. Н. Шипко // Известия вузов. Материалы электрон. техники. — 2000. — № 1. — С. 42—47.
20. Kostishyn, V. G. Magnetic microstructure and properties of $Y_3Fe_5O_{12}$ epitaxial films with the various contents of Pb ions / V. G. Kostishyn, V. V. Medved, L. M. Letyuk // J. Magn. and Magn. Mater. — 2000. — V. 215—216. — P. 519—521.

Статья поступила в редакцию 02 марта 2015 г.

Study of Magnetic and Electrical Hyperfine Interactions in Yttrium Iron Garnet Films by Conversion Electron Mössbauer Spectroscopy

Vladimir Vladimirovich Moklyak — Senior Researcher, Laboratory of Physics of magnetic films (23) (mvvmcv@mail.ru)

G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, NAS of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Boulevard, UA–03680 Kyiv–142,
Ukraine

Abstract. In this paper, we used the method of conversion electron Mössbauer spectroscopy to study the magnetic and electric hyperfine interactions in the surface layers of epitaxial films of yttrium iron garnet (111) grown by liquid phase epitaxy. We observed a violation of the stoichiometry in the surface layers of the anion sublattice ($\approx 8 \cdot 10^{-8}$ m) of the yttrium iron garnet epitaxial film and, as a consequence, the formation of two types of d -positions, due to the large concentration of point defects in the anion sublattice in the surface area and increasing degree of covalence of the chemical communication in the film/air transition layer. We also revealed the existence of fixed doublet components which correspond to the iron ions in the paramagnetic state with an intermediate valence of $+2 \dots +3$. Application of the Hamiltonian mixed quadrupole diagonalization method and magnetic interactions to interpret the spectrum opened up the possibility of constructing a vector diagram of the spatial orientation of the effective magnetic fields at the Fe^{57} nuclei, resulting in restoration of the resultant magnetic moment vector formation mechanism for the yttrium iron garnet epitaxial film. We recorded a slight noncollinearity of magnetic moments at the a - and d -positions of iron which is equal to $\approx 4^\circ$. The results complement the experimental data on the formation of coherent electric and magnetic hyperfine interactions in epitaxial ferrite–garnet films and must be taken into account in the practical use of the magnetic properties of these materials.

Key words: yttrium iron garnet, liquid phase epitaxy, Mössbauer spectroscopy, hyperfine interactions, magnetic microstructure, effective magnetic field, magnetic moment.

References

1. Vonsovskij S. V. *Magnetizm* [Magnetism]. Moscow: Nauka, 1971. 1032 p. (In Russ.)
2. Gudenaf D. *Magnetizm i khimicheskaya svyaz* [Magnetism and the chemical bond]. Moscow: Metallurgiya, 1963. 325 p. (In Russ.)
3. Ubizskii S. B. Orientation states of magnetisation in epitaxial (111)-oriented iron garnet films. *J. Magn. and Magn. Mater.* 1999, vol. 195, pp. 575–582.
4. Belozerskij G. N. *Messbauerovskaya spektroskopiya kak metod issledovaniya poverkhnosti* [Mössbauer spectroscopy as a method for studying the surface]. Moscow: Energoizdat, 1990. 352 p. (In Russ.)
5. Bashkirov Sh. Sh., Ivoilov N. G., Monahov A. A., Chistjakov V. A. Local magnetic field at the iron nuclei in yttrium iron garnet, induced by an external magnetic field. *Fizika tverdogo tela = Physics of the Solid State*. 1973, vol. 15, no. 4, pp. 1058–1061. (In Russ.)
6. Seregin P. P. *Fizicheskie osnovy messbauerovskoj spektroskopii* [Physical basis of Mössbauer spectroscopy]. Sankt–Peterburg: Izd–vo SPbGPTU, 2002. 169 p. (In Russ.)
7. Ostafijchuk B. K., Tkachuk V. M., Tkachuk O. M., Fedoriv V. D. Mössbauer studies of single-crystal films of yttrium iron garnet in an external magnetic field. *Metallofizika i noveishie tekhnologii*. 2000, vol. 22, no. 11, pp. 11–16. (In Russ.)
8. Gol'danskij V. I. *Himicheskie primeneniya messbauerovskoj spektroskopii* [Chemical applications of mössbauer spectroscopy]. Moscow: Mir, 1970. 502 p. (In Russ.)
9. Kamzin A. S., Mal'cev Ju. N. Mössbauer studies of the surface properties of the films and the amount of substituted iron garnets near the Curie point. *Fizika tverdogo tela = Physics of the Solid State*. 1997, vol. 39, no. 8, pp. 1410–1414. (In Russ.)
10. Mahdi S., Abed–Fatah D. Mossbauer spectroscopy study of substituted yttrium iron garnets. *Solid State Comm.* 1996, vol. 97, pp. 471–476.
11. Greneche J. M., Pascard H. Spin reorientation in substituted iron garnets investigated by Mossbauer spectrometry. *J. Magn. and Magn. Mater.* 1995, vol. 147, pp. 115–121.
12. Ostafijchuk B. K., Olejnik V. A., Pylypiv V. M., Semen B. T., Smerklo L. M., Javorskij B. I., Kravec V. I., Koval' I. V. *Kristallicheskaja i magnitnaja struktura implantirovannyh sloev monokristallicheskih plenok zhelezo–ittrievogo granata* [The crystal and magnetic structure of the implanted layers of single-crystal films of yttrium iron garnet]. Kiev: In–t metallofiziki, 1991. 70 p. (prepr. AN USSR). (In Russ.)
13. Alff C., Wertheim G. K. Hyperfine structure of Fe^{57} in yttrium–iron garnet from the Mossbauer effect. *Phys. Rev. B*. 1961, vol. 122, no. 5, pp. 1414–1417.
14. Housley R. M., Grant R. W. Electrostatic forces, molecular–orbital theory and the electric field gradient in yttrium iron garnet. *Phys. Rev. B*. 1972, vol. 29, no. 4, pp. 203–206.
15. Kostishyn V. G., Letyuk L. M., Shipko M. N., Fedoriv V. D. Mössbauer conversive spectroscopy of radiation defects in gamma-irradiated magnetic garnets. *J. Magn. and Magn. Mater.* 1996, vol. 160, pp. 361–362. DOI: 10.1016/0304–8853(96)00231–4
16. Bashkirov Sh. Sh., Ivoilov N. G., Romanov E. S., Kirmenskij A. P. Conversion mössbauer study of epitaxial films of mixed iron garnets. *Fizika tverdogo tela = Physics of the Solid State*. 1982, vol. 24, no. 9, pp. 2641–2647. (In Russ.)
17. Kamzin A. S., Mal'cev Ju. N. Studies of the distribution of cations in the surface layer and the volume of films substituted iron garnets. *Fizika tverdogo tela = Physics of the Solid State*. 1997, vol. 39, no. 7, pp. 1248–1252. (In Russ.)
18. Kostishyn V. G., Medved' V. V., Letyuk L. M. Effect of growth temperature on the structure and properties of some of epitaxial films $Y_3Fe_5O_{12}$. *Neorganicheskie materialy = Inorganic materials*. 1999, vol. 35, no. 2, pp. 222–226. (In Russ.)
19. Kostishyn V. G., Medved' V. V., Letyuk L. M., Shipko M. N. Mössbauer spectroscopy and some optical properties of epitaxial films $Y_3Fe_5O_{12}$ with different contents of Pb ions. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2000, no. 1, pp. 42–47. (In Russ.)
20. Kostishyn V. G., Medved' V. V., Letyuk L. M. Magnetic microstructure and properties of $Y_3Fe_5O_{12}$ epitaxial films with the various contents of Pb ions. *J. Magn. and Magn. Mater.* 2000, vol. 215–216, pp. 519–521.

Received March 2, 2015

ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

PHYSICAL CHARACTERISTICS AND THEIR STUDY

Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2015. Т. 18, № 1. С. 69–74.
ISSN 1609–3577. DOI: 10.17073/1609–3577–2015–1–69–74

УДК 621.315.592

МАГНЕТОСОПРОТИВЛЕНИЕ ОБЛУЧЕННЫХ ПРОТОНАМИ НИТЕВИДНЫХ КРИСТАЛЛОВ $\text{Si}_{0,97}\text{Ge}_{0,03}$

Нитевидные кристаллы — это новый материал, который характеризуется высоким структурным совершенством, химической стойкостью, прочностью, которая для кристаллов небольших поперечных размеров достигает теоретически возможного предела. Исследованные нитевидные кристаллы получены методом химических транспортных реакций в закрытой бромидной системе с использованием золота в качестве инициатора роста. Кристаллы облучали протонами с энергией 6 МэВ и дозами $5 \cdot 10^{13}$, 10^{15} и $1 \cdot 10^{17}$ р⁺/см² при 40 °С на циклотроне У–120.

Изучено влияние протонного облучения и сильных магнитных полей на магнетосопротивление нитевидных кристаллов $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($x = 0,03$) в интервале температур 4,2–300 К. Обнаружено незначительное уменьшение электрического сопротивления кристаллов в температурной области 4,2–40 К в процессе облучения малыми дозами протонов и существенное увеличение сопротивления во всей исследуемой температурной области при облучении дозой $1 \cdot 10^{17}$ р⁺/см². Рассчитана энергия ионизации примесных атомов в разных магнитных полях. Установлено, что энергия примесного уровня практически не зависит от магнитного поля, что, в свою очередь, говорит о независимости концентрации дырок от магнитного поля. Показано, что существенное магнетосопротивление при всех исследованных температурах связано с магнитополевым уменьшением подвижности свободных носителей заряда (дырок). Установлено, что концентрация дырок практически не зависит от магнитного поля. Сделан вывод, что расширение запрещенной зоны в магнитных полях до 8 Тл незначительно.

Ключевые слова: нитевидные кристаллы, кремний–германий, протонное облучение, сопротивление, магнитное поле, магнетосопротивление, подвижность.

© 2015 г. Н. Т. Павловская¹, П. Г. Литовченко¹,
Ю. О. Угрин², Ю. В. Павловский²,
И. П. Островский³, К. Рогацкий⁴

¹Институт ядерных исследований НАН Украины,
просп. Науки, д. 47, Киев, 03680, Украина

²Дрогобычский государственный
педагогический университет имени Ивана Франко,
ул. Ивана Франко, д. 24, Дрогобыч, 82100, Украина

³Национальный университет «Львовская политехника»,
ул. С. Бандеры, д. 12, Львов, 79013, Украина

⁴Международная лаборатория
сильных магнитных полей и низких температур,
ул. Гайовицкая, д. 95, Вроцлав, 53–421, Польша

Введение

Перед современной микроэлектроникой стоит важнейшее задание — получение материалов нового класса. Одним из таких новых материалов являются нитевидные кристаллы, которые характеризуются высоким структурным совершенством, химической стойкостью, прочностью, которая для кристаллов небольших поперечных размеров достигает теоретически возможного предела [1].

Нитевидные кристаллы (НК) находят ряд научных и практических применений. Например, из полупроводниковых НК можно получать высокочувствительные тензодатчики [2]. На их базе соз-

дают сенсоры деформации и давления, работоспособные в широких пределах относительных деформаций (10^{-5} — $5 \cdot 10^{-3}$ отн. ед.) и давлений (1 — 10^4 кбар) [3–5]. На протяжении последних десятилетий проводятся работы по созданию на основе НК композиционных материалов с высокими прочностными параметрами. В частности, предел прочности НК Si–Ge диаметром 5 мкм достигает 5 % [6]. Установлен также ряд размерных эффектов в НК Si. При уменьшении диаметра субмикронных НК имеет место уменьшение параметра решетки [7] и смещение края оптического поглощения в сторону высоких энергий [8]. Наблюдаемые особенности НК Si связывают или с от-

Павловская Надежда Тарасовна¹ — аспирант e-mail: pavlovskyy@mail.ru; Литовченко Петр Григорьевич¹ — доктор физ.-мат. наук, зав. отделом радиационной физики; Угрин Юрий Орестович² — кандидат физ.-мат. наук, доцент; Павловский Юрий Викторович² — кандидат физ.-мат. наук, доцент; Островский Игорь Петрович³ — доктор тех. наук, профессор; Рогацкий Кшиштоф⁴ — доктор физ.-мат. наук, профессор.

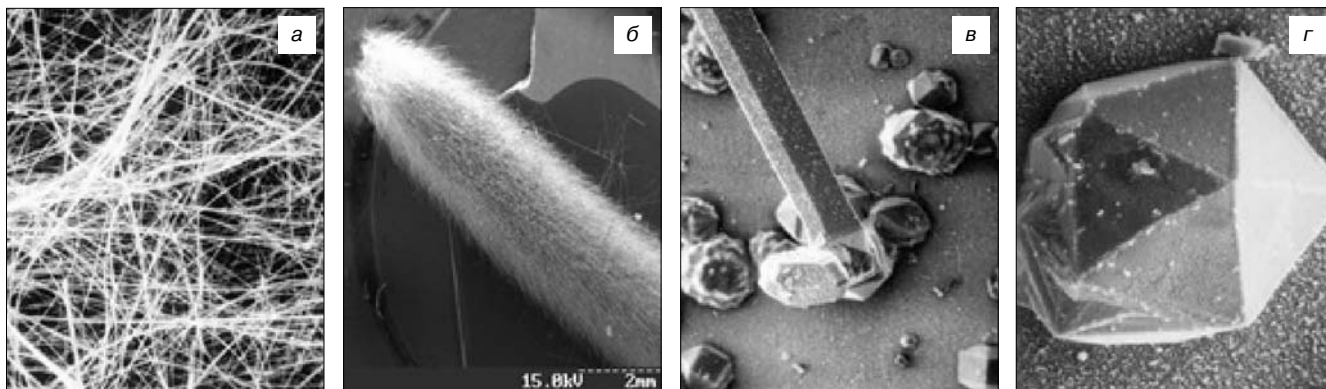


Рис. 1. Образование различных морфологических форм НК в зависимости от температуры кристаллизации: а — квазицилиндрические НК (диаметром 0,1—0,9 мкм); б — двойниковые НК (диаметром 1—2 мкм); в — шестигранные иглообразные НК (диаметром 5—150 мкм); г — изометрические кристаллы (размером 0,1—0,5 мм)

Fig. 1. Formation of differently shaped whiskers depending on crystallization temperature: (a) quasicylindrical whiskers (0.1—0.9 μm in diameter), (b) twin whiskers (1—2 μm in diameter), (c) hexagonal needle whiskers (5—150 μm in diameter) and (d) isometric whiskers (0.1—0.5 mm in diameter)

сутствием дефектов в кристаллической решетке, или с особым их расположением, или с влиянием поверхности. На НК наблюдали интересные магнитные свойства, связанные с возможным образованием суперпарамагнитных кластеров в НК субмикронного диаметра [9]. С другой стороны, высокое совершенство структуры исходных НК позволяет моделировать дефекты, образующиеся в процессе облучения. Так, в работах [10] и [11] исследовали радиационные дефекты, образующиеся в сильно легированных НК $p\text{-Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ под воздействием облучения электронами и γ -квантами (до 10^{18} см^{-2}) соответственно. Как показали проведенные исследования, основными дефектами в кристаллах являются вторичные радиационные дефекты межузельных атомов бора — вакансии. Влияние протонного облучения на электрофизические свойства НК $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ практически не изучено.

Цель работы — исследование магнетосопротивления НК $\text{Si}_{0,97}\text{Ge}_{0,03}$, облученных разными дозами протонов.

Образцы и методы исследования

Выращивание НК SiGe проводили методом химических транспортных реакций в закрытой бромидной системе с использованием золота в качестве инициатора роста. В ростовую ампулу загружали ростовой материал (кремний, германий), легирующие примеси (бор) и галоген (бром), который использовали как транспортирующий агент. Ампулу откачивали до давления 10^{-5} мм рт. ст. и помещали в трубчатую печь с градиентом температуры. Температура зоны источника составляла 900 °С, зоны кристаллизации — 550—750 °С.

С одной затравки получены кристаллы разной морфологии (рис. 1).

Содержание германия в твердом растворе $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ определяли методом микрозондового анализа на установке SAMEBAH. Оно составило $x = 0,03\%$ (моль).

Для исследования воздействия протонного облучения отобраны НК диаметром 40 ± 2 мкм и длиной 2—3 мм (см. рис. 1, в). Они являются кристаллами p -типа проводимости с удельным сопротивлением $\rho = 0,018 \text{ Ом} \cdot \text{см}$.

Кристаллы облучали протонами с энергией 6 МэВ и дозами $5 \cdot 10^{13}$, 10^{15} и $1 \cdot 10^{17} \text{ p}^+/\text{см}^2$ при 40 °С на циклотроне У-120 Института ядерных исследований НАН Украины.

После облучения проводили измерения магнетосопротивления в магнитных полях до 8 Тл в температурном интервале от 4,2 до 300 К в Международной лаборатории сильных магнитных полей и низких температур (г. Вроцлав, Польша).

Результаты и их обсуждение

Облучение минимальной дозой протонов не вызвало существенных изменений электрического сопротивления и магнетосопротивления НК во всем исследуемом температурном интервале. Облучение дозой $10^{15} \text{ p}^+/\text{см}^2$ привело к существенному уменьшению электрического сопротивления НК $\text{Si}_{0,97}\text{Ge}_{0,03}$ в интервале температур 4,2—40 К (рис. 2) и незначительному уменьшению магнетосопротивления в магнитных полях 10—14 Тл (рис. 3). Установлено, что изменение сопротивления при 4,2 К более выражено в образцах с большей концентрацией свободных носителей: сопротивление уменьшается почти вдвое в НК с удельным сопротивлением $\rho_{300\text{K}} = 0,018 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ (см. рис. 2), тогда как в кристаллах с $\rho_{300\text{K}} = 0,025 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ оно уменьшается только на 10 % (рис. 4).

При облучении НК $\text{Si}_{0,97}\text{Ge}_{0,03}$ протонами с энергией 6 МэВ и дозой $1 \cdot 10^{17} \text{ p}^+/\text{см}^2$ наблюдается существенное увеличение электрического сопротивления даже в кристаллах с $\rho_{300\text{K}} = 0,025 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ в сравнении с необлученными образцами (рис. 5), а также значительные изменения магнетосопротивления в низкотемпературной области (рис. 6, 7).

Можно допустить, что в малых дозах при низких температурах облучение не приводит к возникнове-

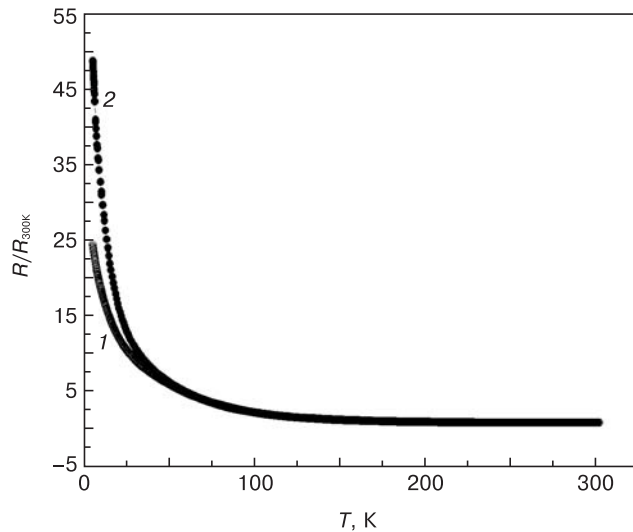


Рис. 2. Температурные зависимости относительного изменения электрического сопротивления НК $\text{Si}_{0.97}\text{Ge}_{0.03}$ с $\rho_{300\text{K}} = 0,018 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ до (1) и после (2) облучения протонами с энергией 6 МэВ и дозой $\Phi = 10^{15} \text{ p}^+/\text{см}^2$

Fig. 2. Relative change in the electrical resistivity of $\text{Si}_{0.97}\text{Ge}_{0.03}$ whiskers with $\rho_{300\text{K}} = 0.018 \text{ Ohm.cm}$ as a function of temperature (1) before and (2) after 6 MeV proton irradiation with a dose of $10^{15} \text{ p}^+/\text{cm}^2$

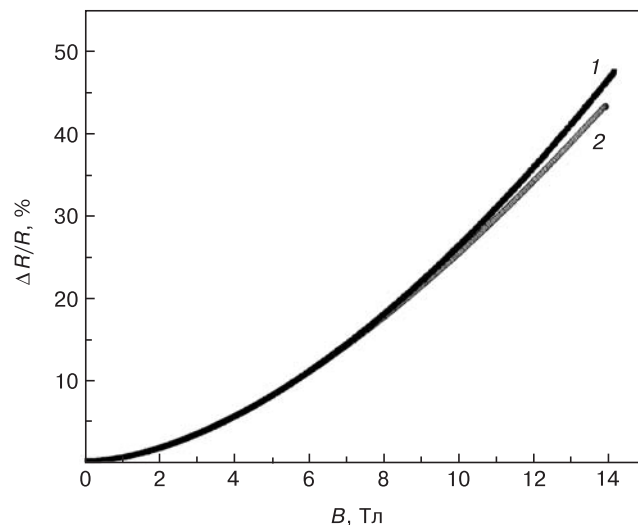


Рис. 3. Полевые зависимости магнетосопротивления НК $\text{Si}_{0.97}\text{Ge}_{0.03}$ с $\rho_{300\text{K}} = 0,018 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ до (1) и после (2) облучения протонами с энергией 6 МэВ и дозой $\Phi = 10^{15} \text{ p}^+/\text{см}^2$

Fig. 3. Field dependence of the magnetoresistance of $\text{Si}_{0.97}\text{Ge}_{0.03}$ whiskers with $\rho_{300\text{K}} = 0.018 \text{ Ohm.cm}$ as a function of temperature (1) before and (2) after 6 MeV proton irradiation with a dose of $10^{15} \text{ p}^+/\text{cm}^2$

нию избыточных носителей заряда, а скорее всего способствует перераспределению плотности состояний в примесной зоне кристалла. В результате при этих дозах облучения возбуждаются атомы примеси, которые одновременно захватывают два носителя заряда с антипараллельными спинами. Следствием облучения может быть инверсная заселенность возбужденных уровней примеси. При таких условиях доминирующим типом проводимости должна быть прыжковая проводимость по верхней зоне Хаббарда [12]. В этом случае облучение должно привести к большим изменениям электрического сопротивления в образцах с большей концентрацией примеси,

что и наблюдалось экспериментально (см. рис. 2 и 4). Большие дозы облучения приводят к образованию макродефектов в кристалле, что сопровождается значительным рассеиванием носителей заряда на этих дефектах и существенным возрастанием электрического сопротивления кристаллов (см. рис. 5).

Как видно из рис. 6 и 7, при всех температурах измерения магнетосопротивление облученных НК не зависит от магнитного поля в слабых полях, удовлетворяя условию слабого поля $\mu_p B \ll 1$, где $\mu_p \approx 10^4 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ — подвижность дырок [13]. Далее при возрастании магнитного поля магнетосопротив-

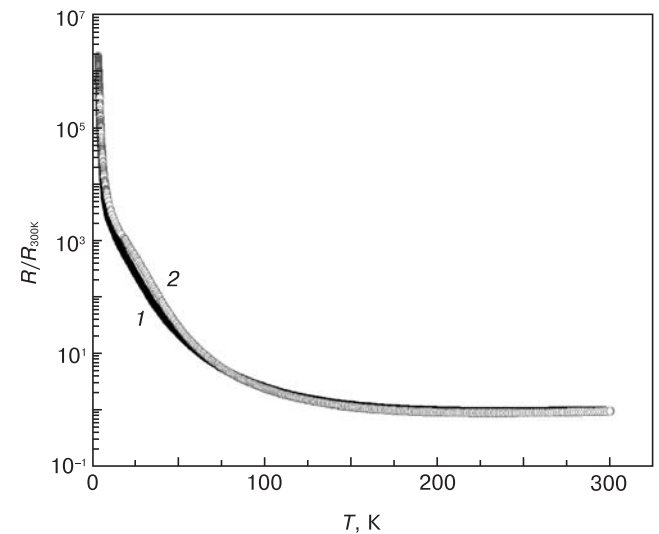


Рис. 4. Температурные зависимости относительного изменения электрического сопротивления НК $\text{Si}_{0.97}\text{Ge}_{0.03}$ с $\rho_{300\text{K}} = 0,025 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ до (1) и после (2) облучения протонами с энергией 6 МэВ и дозой $\Phi = 10^{15} \text{ p}^+/\text{см}^2$

Fig. 4. Relative change in the electrical resistivity of $\text{Si}_{0.97}\text{Ge}_{0.03}$ whiskers with $\rho_{300\text{K}} = 0.025 \text{ Ohm.cm}$ as a function of temperature (1) before and (2) after 6 MeV proton irradiation with a dose of $10^{15} \text{ p}^+/\text{cm}^2$

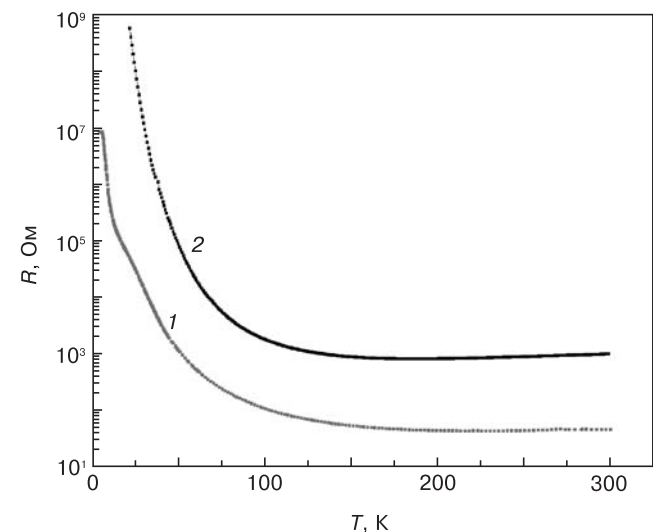


Рис. 5. Температурные зависимости электрического сопротивления НК $\text{Si}_{0.97}\text{Ge}_{0.03}$ с $\rho_{300\text{K}} = 0,025 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ до (1) и после (2) облучения протонами с энергией 6 МэВ и дозой $\Phi = 1 \cdot 10^{17} \text{ p}^+/\text{см}^2$

Fig. 5. Dependence of the electrical resistivity of $\text{Si}_{0.97}\text{Ge}_{0.03}$ whiskers with $\rho_{300\text{K}} = 0.025 \text{ Ohm.cm}$ as a function of temperature (1) before and (2) after 6 MeV proton irradiation with a dose of $10^{17} \text{ p}^+/\text{cm}^2$

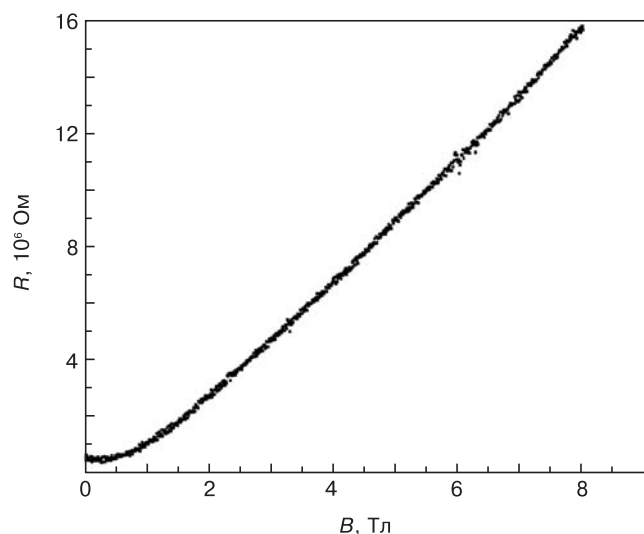


Рис. 6. Полевая зависимость магнетосопротивления НК $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, облученных протонами дозой $1 \cdot 10^{17} \text{ p}^+/\text{cm}^2$ при температуре измерения 41 К

Fig. 6. Field dependence of the magnetoresistance of $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ whiskers irradiated with $10^{17} \text{ p}^+/\text{cm}^2$ of protons measured at 41 K

ление заметно возрастает. Выясним природу такого поведения магнетосопротивления.

Известно, что для случая слабых магнитных полей существует полуклассическая аналитическая зависимость удельного сопротивления полупроводников от индукции магнитного поля [14] из которой следует, что эта зависимость возникает только в случае наличия в полупроводнике более одного типа свободных носителей заряда. Для того, чтобы выяснить подчиняются ли полученные авторами экспериментальные данные, показанные на рис. 6 и 7, этой модели, оценим концентрацию дырок и электронов в образцах при температурах измерения T , равных 41 и 89 К. При $T = 41 \text{ К}$, учитывая, что удельное сопротивление в отсутствие магнитного поля $\rho_0 = 90 \text{ Ом} \cdot \text{см}$, а подвижность дырок $\mu_p \approx 10^4 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$

$$[13], \text{ получаем } p = \frac{1}{e\mu_p} \approx 10^{13} \text{ см}^{-3}.$$

Из зависимости собственной концентрации от температуры для кремния $\lg(np) = -3460 \frac{1}{T} + 21,5$ по-

лучаем, что при $T = 41 \text{ К}$ $n \approx 10^{-135} \text{ см}^{-3}$, т. е. свободные электроны практически отсутствуют. При $T = 89 \text{ К}$ $n \approx 10^{-48} \text{ см}^{-3}$, что обозначает то же самое. Таким образом, в образцах имеется только один тип свободных носителей заряда, что, согласно полуклассической модели магнетосопротивления, должно приводить к его отсутствию. Действительно, в полях до 0,6—0,8 Тл это так. Наличие магнетосопротивления в полях более 0,8 Тл требует объяснения за рамками указанной выше модели. Дело в том, что параметры свободных носителей тока, такие, как концентрация и подвижность, сами зависят от магнитного поля, а в сущности, уменьшаются с его возрастанием.

Определим, что приводит к возрастанию сопротивления с увеличением магнитного поля: уменьшение концентрации свободных носителей заряда (так называемое магнитное вымораживание) или уменьшение их подвижности?

Механизм магнитного вымораживания состоит в следующем. В магнитном поле как зона проводимости, так и валентная зона расщепляются на уровни Ландау. При этом дно зоны проводимости (нижний уровень Ландау) поднимается, а потолок валентной зоны снижается, расширяя запрещенную зону (рис. 8), возвращая часть электронов из зоны проводимости обратно в валентную зону или на донорный

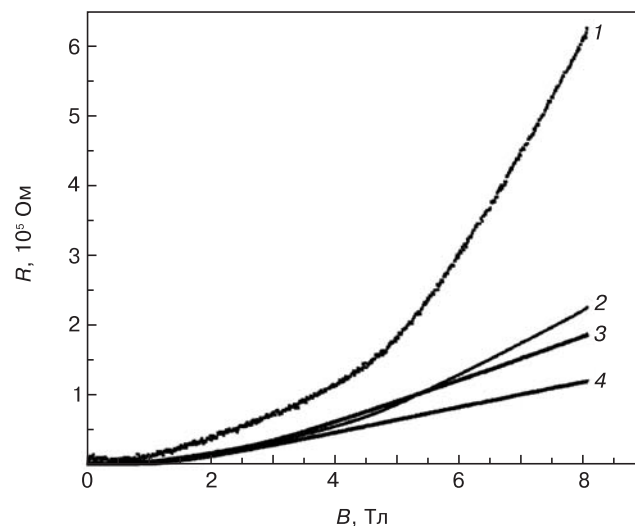


Рис. 7. Полевые зависимости магнетосопротивления НК $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ облученных протонами дозой $1 \cdot 10^{17} \text{ p}^+/\text{cm}^2$, при различных температурах измерения T , К: 1 — 65; 2 — 75; 3 — 80; 4 — 89

Fig. 7. Field dependence of the magnetoresistance of $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ whiskers irradiated with $10^{17} \text{ p}^+/\text{cm}^2$ of protons measured at T , К: (1) 65, (2) 75, (3) 80 and (4) 89

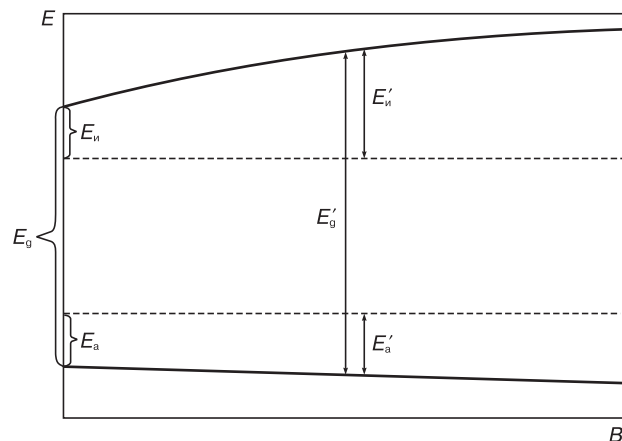


Рис. 8. Схематическая зависимость положения нижней зоны проводимости и верхнего уровня валентной зоны от магнитного поля в полупроводнике.

E_g, E_a, E_i — ширина запрещенной зоны, энергия активации акцептора и энергия ионизации донора соответственно. E'_g, E'_a, E'_i — те же величины в магнитном поле

Fig. 8. Schematic dependence of the band gap bottom and valence band top positions on magnetic field in a semiconductor. E_g, E_a and E_i are band gaps, acceptor activation energy and donor ionization energy, respectively, and E'_g, E'_a and E'_i are the same parameters in a magnetic field

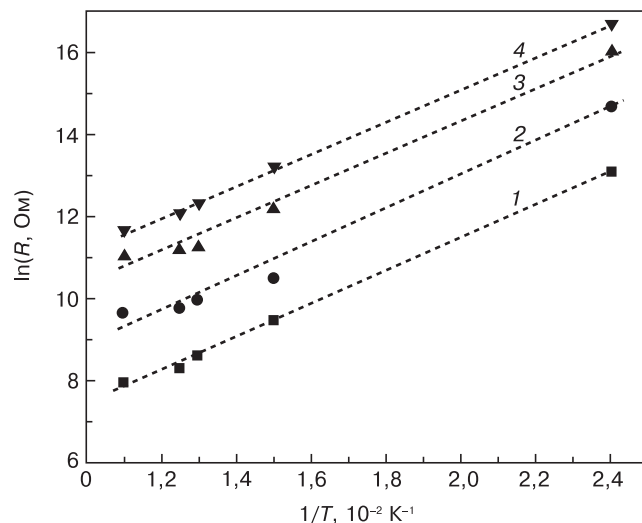


Рис. 9. Зависимости логарифма магнетосопротивления НК $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, облученных протонами с дозой $1 \cdot 10^{17} \text{ p}^+/\text{cm}^2$, от обратной температуры в разных магнитных полях B , Тл: 1 — 0; 2 — 2; 3 — 5; 4 — 8

Fig. 9. Logarithmic magnetoresistance of $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ whiskers irradiated with $10^{17} \text{ p}^+/\text{cm}^2$ of protons as a function of inverse temperature in different magnetic fields B , Tl: (1) 0, (2) 2, (3) 5 and (4) 8

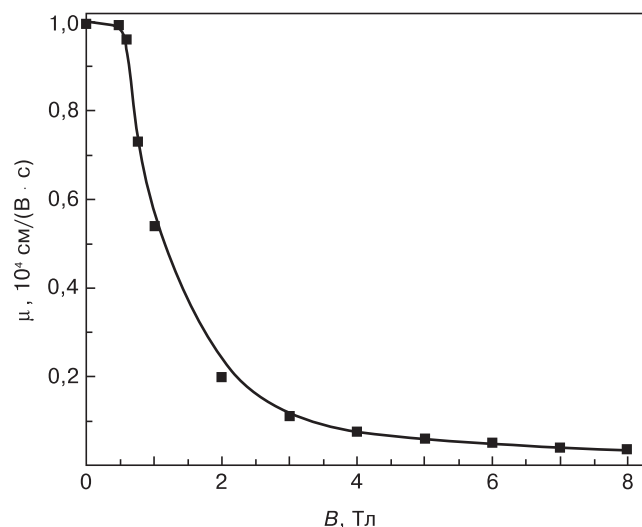


Рис. 10. Зависимость подвижности свободных носителей заряда (дырок) от магнитного поля в НК $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, облученных протонами с дозой $1 \cdot 10^{17} \text{ p}^+/\text{cm}^2$

Fig. 10. Free carrier (hole) mobility as a function of magnetic field in $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ whiskers irradiated with $10^{17} \text{ p}^+/\text{cm}^2$ of protons

уровень, а также из акцепторного уровня обратно в валентную зону. Таким образом, магнитное поле влияет так же как и понижение температуры: уменьшает концентрацию свободных носителей заряда и в зоне проводимости, и в валентной зоне.

Для выяснения влияния магнитного вымораживания вычислим энергию ионизации примесных атомов в разных магнитных полях. Оценка энергии ионизации по наклону прямой $\ln R = f(1/T)$ (рис. 9) дает значение 0,072 эВ. Согласно литературным данным, это может быть Ga (0,073 эВ) или Al (0,069 эВ), которые являются акцепторами в Si [14]. Из рис. 9 также видно, что энергия ионизации примеси практически не зависит от магнитного поля. Это значит,

что энергия примесного уровня практически не зависит от магнитного поля, что, в свою очередь, говорит о независимости концентрации дырок от магнитного поля.

Таким образом, существенное магнетосопротивление при всех исследованных температурах связано с магнитополевым уменьшением подвижности свободных носителей заряда (дырок) при увеличении магнитного поля (рис. 10). Концентрация дырок от магнитного поля практически не зависит. Это приводит к выводу, что расширение запрещенной зоны в магнитных полях до 8 Тл незначительно.

Заключение

Изучено влияние протонного облучения и сильных магнитных полей на магнетосопротивление НК $\text{Si}_{0,97}\text{Ge}_{0,03}$ в интервале температур 4,2—300 К. Обнаружено незначительное уменьшение электрического сопротивления кристаллов в температурной области 4,2—40 К в процессе облучения малыми дозами протонов и существенное увеличение электрического сопротивления во всей исследуемой температурной области при облучении дозой $1 \cdot 10^{17} \text{ p}^+/\text{cm}^2$. Рассчитана энергия ионизации примесных атомов в разных магнитных полях. Установлено, что энергия примесного уровня практически не зависит от магнитного поля, что в свою очередь, говорит о независимости концентрации дырок от магнитного поля. Показано, что существенное магнетосопротивление при всех исследованных температурах связано с магнитополевым уменьшением подвижности свободных носителей заряда (дырок). Установлено, что концентрация дырок практически не зависит от магнитного поля. Это приводит к выводу, что расширение запрещенной зоны в магнитных полях до 8 Тл незначительно.

Библиографический список

1. Гиваргизов, Е. И. Рост нитевидных и пластинчатых кристаллов из пара / Е. И. Гиваргизов. — М.: Наука, 1977. — 304 с.
2. Baitsar, R. Mechanical sensors based on Si-Ge whiskers / R. Baitsar, V. Voronin, E. Krasnogenov, N. Bogdanova // Sensors and Actuators. A. — 1992. — V. 30. — P. 175—181.
3. Voronin, V. Silicon whiskers for mechanical sensors / V. Voronin, I. Maryamova, Y. Zaganyach, E. Karetnikova, A. Kutrakov // Sensors and Actuators. A. — 1992. — V. 30. — P. 27—33.
4. Maryamova, I. Mechanical sensors for cryogenic temperatures / I. J. Maryamova, E. N. Karetnikova, I. D. Gortynskaya, Ju. S. Yatzuk / Int. Conf. Actual problems of electronics instrument engineering (APEIE-92). — Novosibirsk, 1992. — V. 4. — P. 96—99.
5. Maryamova, I. Low temperature semiconductor mechanical sensors / I. Maryamova, A. Druzhinin, E. Lavitska, I. Hortynska, Y. Yatzuk // Sensors and Actuators. A. — 2000. — V. 85. — P. 153—157.
6. Baitsar, R. I. Mechanical properties of silicon-germanium alloy whiskers / R. I. Baitsar, I. V. Kurylo, S. S. Varshava, I. P. Ostrovskii // Functional materials. — 2001. — V. 8, N 2. — P. 398—400.
7. Климовская, А. И. Рентгенометрическое исследование субмикронных нитевидных кристаллов кремния n-типа / А. И. Климовская, И. П. Островский, Р. И. Байцар // Изв. РАН. Сер. физ. — 1993. — Т. 57, № 11. — С. 210—213.
8. Gule, E. G. Visible light emission from free-standing filament crystals of silicon / E. G. Gule, G. Yu. Rudko, A. I. Klimovskaya, M. Ya. Valakh, I. P. Ostrovskii // Physica status solidi. — 1997. — V. 161. — P. 565—571.

9. Цмоць, В. М. Исследование и моделирование магнитной восприимчивости нитевидных кристаллов Si и $\text{Si}_{0,95}\text{Ge}_{0,05}$ / В. М. Цмоць, П. Г. Литовченко, Н. Т. Павловская, И. П. Островский, Ю. В. Павловский // ФТП. – 2010. – Т. 44, вып. 5. – С. 649–653.

10. Дружинин, А. А. Исследование влияния электронного облучения на кремниевые тензорезисторы / А. А. Дружинин, И. И. Марьямова, А. П. Кутраков, Н. С. Лях-Кагуй, В. Т. Маслюк, И. Г. Мегела // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. – 2010. – № 1(85). – С. 26–29.

11. Дружинин, А. О. Влияние облучения γ -квантами на свойства нитевидных кристаллов Si–Ge / А. О. Дружинин,

И. П. Островский, Ю. Н. Ховерко, В. М. Цмоць, Ю. В. Павловский, Н. Т. Павловская, В. Ю. Поварчук // Физика и химия твердого тела. – 2010. – Т. 11, № 1. – С. 89–92.

12. Агринская, Н. В. Проявление E_2 -проводимости в магнито-сопротивлении многодолинных полупроводников / Н. В. Агринская // ФТП. – 1999. – Т. 33, № 2. – С. 161–169.

13. Киреев, П. С. Физика полупроводников / П. С. Киреев. – М.: Высш. школа, 1975. – 584 с.

14. Смит, Р. Полупроводники / Р. Смит. – М.: Мир, 1992. – 558 с.

Статья поступила в редакцию 28 января 2015 г.

ISSN 1609–3577 Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2015, vol. 18, no. 1, pp. 69–74.

Magnetoresistance of Proton Irradiated $\text{Si}_{0,97}\text{Ge}_{0,03}$ Whiskers

Nadezhda Tarasovna Pavlovskaya¹ — Postgraduate Student (pavlovskyy@mail.ru); Petr Grigorevich Litovchenko¹ — Dr. Sci. (Phys.–Maht.), Professor, Head Department of Radiation Physics; Yuriy Orestovich Ugrin² — Cand. Sci. (Phys.–Maht.), Associate Professor; Yuriy Viktorovich Pavlovskiy² — Cand. Sci. (Phys.–Maht.), Associate Professor; Igor Petrovich Ostrovskii³ — Dr. Sci. (Eng.), Professor; Krzysztof Rogacki⁴ — Professor, Dr.

¹Institute for Nuclear Research National Academy of Sciences of Ukraine (NASU),

47 Prospekt Nauky, Kiev UA–03680, Ukraine

²Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University,

34 I. Franko Str, Drohobych 82100, Ukraine

³Lviv Polytechnic National University,

12 Bandera str., Lviv 79013, Ukraine

⁴International Laboratory

of High Magnetic Fields and Low Temperatures,

95 Gajowicka str., Wroclaw 53–421, Poland

Abstract. Whiskers are a new material that is characterized by high structural perfection, chemical resistance and strength which reaches the theoretically possible limit for crystals of small transverse dimensions. The test whiskers were synthesized by the method of chemical transport reactions in a closed bromide system using gold as the initiator of growth. The crystals were irradiated by protons with an energy of 6 MeV and doses of $5 \cdot 10^{13}$, 10^{15} and $1 \cdot 10^{17} \text{ p}^+/\text{cm}^2$ at 40 °C in a U–120 cyclotron.

The effects of proton irradiation and high magnetic fields on the magnetoresistance of $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($x = 0,03$) whiskers in the 4,2–300 K temperature range has been studied. A slight decrease in the electrical resistance of the crystals in the 4,2–40 K temperature range during irradiation with small proton doses and a significant increase in their resistance in the entire investigated temperature range for a dose of $1 \cdot 10^{17} \text{ p}^+/\text{cm}^2$ have been found. The ionization energy of the impurity atoms in different magnetic fields has been calculated. It has been revealed that the energy level of the impurity depends on the magnetic field but slightly which in turn indicates a independence of the concentration of holes on the magnetic field. It has been shown that a significant magnetoresistance at all studied temperatures was due to the magnetic field–caused decrease in the mobility of free charge carriers (holes). It has been found that the concentration of holes depends on magnetic field but a little. Conclusion has been made about a negligible expansion of the band gap in magnetic fields of up to 8 T.

Keywords: whiskers, silicon–germanium, proton irradiation, resistance, magnetic field, magnetoresistance, mobility.

References

- Givargizov E. I. *Growth of whiskers and the plate-like of crystals from the vapour*. Moscow: Nauka, 1977. 304 p. (In Russ.)
- Baitsar R., Voronin V., Krasnogenov E., Bogdanova N. Mechanical sensors based on Si–Ge whiskers. *Sensors and Actuators*. 1992, vol. A30, pp. 175–181.
- Voronin V., Maryamova I., Zaganyach Y., Karetnikova E., Kuttrakov A. Silicon whiskers for mechanical sensors. *Sensors and Actuators*. 1992, vol. A30, pp. 27–33.
- Maryamova I. J., Karetnikova E. N., Gortynskaya I. D., Yatzuk Ju. S. *Mechanical sensors for cryogenic temperatures*. Int. Conf. Actual Problems of Electronics Instrument Engineering (APEIE–92). Novosibirsk, 1992. Vol. 4, pp. 96–99.
- Maryamova I., Druzhinin A., Lavitska E., Hortynska I., Yatzuk Y. Low temperature semiconductor mechanical sensors. *Sensors and Actuators*. 2000, vol. A85, pp. 153–157.
- Baitsar R. I., Kurylo I. V., Varshava S. S., Ostrovskii I. P. Mechanical properties of silicon–germanium alloy whiskers. *Functional materials*. 2001, vol. 8, no. 2, pp. 398–400.
- Klimovskaya A. I., Ostrovskii I. P., Baitsar R. I. Radiometric study of submicron whiskers of silicon n -type. *Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics*. 1993, vol. 57, no. 11, pp. 210–213. (In Russ.)
- Gule E. G., Rudko G. Yu., Klimovskaya A. I., Valakh M. Ya. and Ostrovskii I. P. Visible light emission from free-standing filament crystals of silicon. *Physica status solidi*. 1997, vol. 161, pp. 565–571.
- Tsmots V. M., Litovchenko P. G., Pavloska N. T., Pavlovskyy Yu. V., Ostrovskyy I. P. Study and simulation of magnetic susceptibility of Si and $\text{Si}_{0,95}\text{Ge}_{0,05}$ whiskers. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov = Semiconductors*. 2010, vol. 44, no. 5, pp. 649–653. (In Russ.)
- Druzhinin A. A., Maryamova I. I., Kuttrakov A. P., Lach-Kahuj N. S., Masluk V. T., Megela I. G. Investigation of the effect of electron irradiation on of silicon strain gages. *Technologija i konstruirovanie v elektronnoj apparature*. 2010, vol. 85, no. 1, pp. 26–29. (In Russ.)
- Druzhinin A. A., Ostrovskii I. P., Khoferko Yu. M., Tsmots V. M., Pavlovskyy Yu. V., Pavloska N. T., Povarchuk V. Yu. Influence of γ -irradiation on Si–Ge whiskers properties. *Physics and chemistry of solid state*. 2010, vol. 11, no. 1, pp. 89–92. (In Russ.)
- Agrinskaya N. V. Manifestation of E_2 -conductivity in the magneto resistance many-valley semiconductors. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov = Semiconductors*. 1999, vol. 33, no. 2, pp. 161–169. (In Russ.)
- Kireev P. S. *Physics of semiconductors*. Moscow: Vysshaya shkola, 1975. 584 p. (In Russ.)
- Smith R. *Semiconductors*. Moscow: Mir, 1992. 558 p. (In Russ.)

Received January 28, 2015

АНАТОЛИЙ ВАСИЛЬЕВИЧ ДВУРЕЧЕНСКИЙ (К 70-летию СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ)



10 апреля 2015 г. исполнилось 70 лет заместителю директора, заведующему лабораторией неравновесных полупроводниковых систем Института физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук, лауреату Государственной премии, члену-корреспонденту РАН Анатолию Васильевичу Двуреченскому.

А. В. Двуреченский — известный в мире специалист в области радиационной физики, атомной структуры и электронных явлений в полупроводниках и полупроводниковых низкоразмерных системах, технологии полупроводниковой микро-, опто- и наноэлектроники. Область научной деятельности А. В. Двуреченского — атомная и электронная конфигурация дефектов, вводимых в полупроводники при облучении быстрыми частицами, синтез полупроводниковых наногетероструктур из молекулярных пучков, гетероструктуры с квантовыми точками, квантовыми ямами, лазерный отжиг.

А. В. Двуреченский в 1968 г. окончил физический факультет Новосибирского государственного университета по специальности «физика». Его научная деятельность началась в Институте физики полупроводников СО АН СССР в лаборатории радиационной физики. Перед молодым сотрудником была поставлена задача исследования дефектов в кремнии методом электронного парамагнитного резонанса. В 1974 г. он защитил кандидатскую диссертацию «Взаимодействие дефектов, введенных ионной бомбардировкой в кремний, между собой и примесью»,

а в 1988 г. ему была присуждена степень доктора физико-математических наук за работу «Радиационная модификация неупорядоченных систем на основе кремния». В 1993 г. Анатолию Васильевичу было присвоено звание профессора по специальности «Физика полупроводников и диэлектриков». В 2008 г. он был избран членом-корреспондентом РАН (специальность «наноэлектроника») по Отделению нанотехнологий и информационных технологий РАН.

Основная направленность проводимых А. В. Двуреченским исследований была связана с разработкой метода и технологии процесса легирования полупроводников с помощью ионной имплантации, а также нейтронного облучения. В реализации радиационных методов легирования полупроводников главная проблема заключалась в огромном числе дефектов, возникающих в материале при насильственном введении даже единичного элемента с помощью ускорительной техники. Вводимые дефекты катастрофически изменяли свойства материала, особенно полупроводников как наиболее чувствительных к внешним воздействиям даже при слабых потоках частиц. Дефекты фактически маскировали проявление легирования материала — изменение свойств, связанных с внедренным химическим элементом. Полученные А. В. Двуреченским с коллегами результаты исследований формирования и перестройки дефектов, перехода кристалла в аморфное состояние при ионном облучении привели к первым успехам в решении проблем легирования материала. Температура перекристаллизации аморфизированных ионной имплантацией слоев оказалась заметно ниже температуры устранения многих точечных и протяженных дефектов кристаллической структуры.

Прорывным успехом в решении проблемы устранения дефектов стало «Открытие явления импульсной ориентированной кристаллизации твердых тел («лазерный отжиг»)». Именно под таким названием за цикл работ по исследованию процессов взаимодействия импульсного излучения с твердым телом в 1988 г. А. В. Двуреченскому с коллегами из ИФП СО АН, КФТИ АН, ФТИ им. Иоффе и ФИАН была присуждена Государственная премия СССР. Суть явления заключалась в восстановлении кристаллической структуры после импульсного воздействия лазерного излучения на ионно-легированные полупроводниковые пластины с аморфным слоем. Скорость превращения аморфного слоя в монокристаллическую область оказалась на много порядков выше величин, типичных для роста кристаллов. Этот факт вызывал особый интерес к лазерному отжигу у исследователей различных областей. А. В. Двуреченским с кол-

легами установлены закономерности структурных превращений и растворимости легирующих элементов при высоких скоростях кристаллизации в условиях импульсного лазерного/электронного нагрева аморфных слоев кремния. В рамках международного сотрудничества по теме «Разработка физических основ ионно-импульсной модификации материалов микроэлектроники» в 1988 г. ему с коллегами была присуждена международная премия Академий наук СССР и ГДР. С позиций практического применения развитое направление обеспечило наиболее полную реализацию достоинств технологии ионной имплантации, ставшую в настоящее время главной и фактически единственной технологией в процессах легирования полупроводников при производстве изделий электронной техники во всем мире. Импульсный (лазерный) отжиг также стал базовой технологией в ведущих мировых фирмах — производителях различных схем и устройств электронной техники.

На основе проводимых в настоящее время исследований морфологических изменений поверхности при росте из молекулярных, ионно-молекулярных пучков и последующего лазерного отжига А. В. Двуреченским с сотрудниками разработана технология создания нового класса полупроводниковых гетероструктур с квантовыми точками в системе германий/кремний (двухмерные и трехмерные ансамбли квантовых точек). Предложены и разработаны методы, обеспечивающие повышение однородности ансамбля квантовых точек по размерам, упорядочению их в пространстве, выполнены пионерные работы по изучению электрических, оптических и магнитных явлений в созданных наногетероструктурах, выявлены одноэлектронные и коллективные эффекты, установлены электронная структура одиночных и ансамбля туннельно-связанных квантовых точек, закономерности переноса заряда, оптических переходов и спиновых состояний. На основе полученных фундаментальных результатов по направлению «Нанотехнологии и наноматериалы» разработаны новые подходы в создании полупроводниковых приборов.

А. В. Двуреченский сочетает научно-исследовательскую работу с педагогической деятельностью: с 1987 г. преподает в Новосибирском нацио-

нальном исследовательском государственном университете на кафедре «Физика полупроводников», с 1991 г. — профессор этой кафедры. Он разработал и читает спецкурсы «Радиационная физика полупроводников», «Физические основы нанотехнологии». А. В. Двуреченский является автором и соавтором более 380 научных публикаций, включая главы в 9 коллективных монографиях, получил 10 авторских свидетельства, три патента. Под его научным руководством защищены три докторские и двенадцать кандидатских диссертаций.

В рамках международного сотрудничества работал в Университете штата Нью-Йорк в Олбани (США), исследовательском центре Россендорф в Дрездене (Германия), Университете Фудан в Шанхае (КНР). С 2012 г. — член комиссии по развитию физики Международного союза фундаментальной и прикладной физики (International Union of Pure and Applied Physics, IUPAP).

А. В. Двуреченский принимает активное участие в жизни Института, РАН, г. Новосибирска. Он является заместителем председателя Научного совета РАН по проблеме «Радиационная физика твердого тела», членом научных советов РАН по проблемам «Физика полупроводников» и «Физико-химические основы материаловедения полупроводников», членом редколлегии журналов «Известия вузов. Материалы электронной техники», «Успехи прикладной физики», заместителем председателя диссертационного совета по защитах докторских и кандидатских диссертаций при ИФП СО РАН, руководителем ряда программ СО РАН, членом Экспертного совета ВАК по физике. В 2008—2010 гг. А. В. Двуреченский являлся членом рабочей группы федеральной целевой программы РФ «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007—2012 годы» по направлению «Индустрия наносистем и материалы».

Работы члена-корреспондента РАН А. В. Двуреченского отмечены правительственными наградами: Государственной премией СССР (1988 г.), премией Академий наук СССР и ГДР (1988 г.), Правительства РФ в области образования (2014 г.). Имеет грамоты РАН (2004 г.), Министерства образования и науки РФ (2007 г.), города Новосибирска (2014, 2015 гг.).

От всей души поздравляем Анатолия Васильевича с юбилеем, желаем ему крепкого здоровья, счастья и успехов в реализации его научных планов.

Коллеги, друзья, ученики