

На правах рукописи

Лазебных Виталий Юрьевич

**Теоретическое исследование электронной и пространственной
структуры наклонных межзеренных границ в кристаллическом
кремнии**

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Автореферат

**диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук**

Иркутск-2013

Работа выполнена лаборатории физики монокристаллов отдела физики твердотельных материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки “Институт геохимии им А.П. Виноградова Сибирского отделения Российской академии наук”

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук, **Мысовский Андрей Сергеевич**

Официальные оппоненты: **Архинчев Валерий Ефимович**, доктор физико-математических наук, профессор кафедры космической физики ФГБОУ ВПО “БГУ”, ФГБУН ИФМ СО РАН, главный научный сотрудник
ФГБУН БНЦ СО РАН, ведущий научный сотрудник
Федина Людмила Ивановна, кандидат физико-математических наук, ФГБУН ИФП им. А.В. Ржанова СО РАН, ведущий научный сотрудник

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки “Физико-технологический институт Российской академии наук”.

Защита состоится 4 марта 2014 года в 11⁰⁰ часов на заседании диссертационного совета Д 212.074.04 в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования “Иркутский государственный университет” по адресу: 664003, г. Иркутск, бульвар Гагарина, 20.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования “Иркутский государственный университет”.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью учреждения, просим направлять ученому секретарю совета Мангазееву Борису Викторовичу по адресу 664003, г. Иркутск, бульвар Гагарина, 20. Тел.: 8(3952) 52-12-72.

Автореферат разослан “__” _____ 201__ г.

Учёный секретарь
диссертационного совета

Мангазеев Б. В.

Общая характеристика работы

Для развития солнечной энергетики требуется материал, из которого можно получить дешевые фотоэлектрические преобразователи. Одним из перспективных материалов на эту роль является мультикремний. Сырьем для его производства может служить дешевый металлургический кремний. Однако КПД ФЭП, на основе мультикремния, не велик. Возможности повышения КПД ограничены из-за наличия центров рекомбинации, в роли которых могут выступать как примеси, так и межзеренные границы (МЗГ), а также граничные дефекты и дислокации. Наличие таких дефектов приводит к появлению глубоких уровней в запрещенной зоне полупроводника. Для борьбы с ними используют методы пассивации и геттерирования.

Несмотря на многочисленные существующие модели границ, до сих пор нет единого мнения о том, что же главным образом отвечает за электрическую активность – граница, как таковая или какие-то внешние дефекты, например, дислокации, вакансии, примеси, сегрегированные на ней. Границам нередко приписывают координационные дефекты, такие как 3-х или 5 координированные атомы, т.е. имеющие ненасыщенные или оборванные связи. Такие дефекты, по мнению авторов [1], образуются вместе с границей и существуют при комнатной температуре. Авторы [2] полагают, что наличие координационных дефектов в особенности характерно для скрученных границ. В той же работе говорится о частичной аморфизации приграничного слоя. Однако другой группе авторов [3] удалось построить модели МЗГ без координационных дефектов, обладающие пространственной упорядоченностью и низкой энергией, в том числе и для скрученных границ. Таким образом, на сегодняшний момент в литературе нет единого мнения даже о структуре бездефектных и беспримесных границ и вопрос об их строении является дискуссионным.

Аргументом в пользу одной из позиций может послужить моделирование

произвольных границ с целью получить упорядоченную структуру без координационных дефектов. Если окажется, что такая структура возможна для случайно выбранной границы, то позиция авторов [3], утверждающая упорядоченность безпримесных границ и отсутствие на них координационных дефектов, получит дополнительное подтверждение. В противном случае подтверждение получает противоположная позиция. Не исключено, что правильный ответ на данный вопрос будет включать в себя обе эти точки зрения. Так, например, в работе [4] искусственно синтезировалась граница $\Sigma 5\{310\}$ с малым угловым отклонением от идеального для нее угла разориентации $\alpha = 36.87^\circ$. Обнаружено, что электрическая активность границы отсутствует при нулевом отклонении и растет с величиной этого отклонения. То есть, возможно, существуют «идеальные» границы, без координационных дефектов, а малые угловые отклонения от них порождают на границе неупорядоченность, координационные дефекты и, как следствие, глубокие уровни.

Что касается сегрегации точечных дефектов, в экспериментах с помощью радиоактивных изотопов и авторадиографии высокого разрешения было качественно продемонстрировано, что сегрегация углерода и водорода в поликристаллическом кремнии имеет место только на ограниченном числе МЗГ [5]. В исследовании [6] анализировалось локальное электрохимическое травление пленки германия и кремния для просвечивающей электронной микроскопии. Показано, что число включенных в сегрегацию атомов зависит от вектора Бюргера дислокации. Эксперименты [7] показывают, что проникновение примесей вдоль МЗГ зависит не только от угла разориентации или положения МЗГ, но и от направления внутри МЗГ, т.е. является анизотропным в плоскости границы. Таким образом, можно перечислить целый ряд важных вопросов касательно сегрегации примесей на МЗГ, ответов на которые на сегодняшний день нет: на каких типах границ будет наблюдаться сегрегация данной примеси? как гра-

ница влияет на кинетику диффузии данной примеси и на ее распределение в поликристалле? создаст ли примесь глубокие уровни? возникнут ли электростатические эффекты (объемный заряд границы) и как это повлияет на перенос носителей заряда через границу?

В теоретических работах [8–10] успешно находятся энергии сегрегации и наиболее вероятные положения дефектов на границе. Но данные расчеты затрагивают всего несколько границ, $\Sigma 5$ (130)[001] и $\Sigma 3$ ($2\bar{1}1$)[011]. Главным образом это связано с вычислительными трудностями – ведь некоторые модели границ содержат от 500 атомов. Расчет распределения примесей на таких моделях требует значительного времени. Поэтому, на наш взгляд, не было систематических попыток связать локальную структуру и сегрегацию на границах.

Целью диссертационной работы является теоретическое исследование межзеренных границ методами классической молекулярной механики и квантовой химии твердого тела, установления их геометрических моделей, зависимости энергии сегрегации от структуры.

Для достижения поставленной цели в работе необходимо было решить следующие задачи:

1. разработать программный комплекс, реализующий поиск оптимальной геометрии на основе генетического алгоритма;
2. найти оптимальные геометрии произвольных специальных границ;
3. на основе полученных структур произвести расчет энергии сегрегации;
4. проанализировать зависимость энергии сегрегации от структуры границ.

Научная новизна работы отражена в следующих положениях, выносимых на защиту:

1. Установлены модели асимметричных наклонных границ $\Sigma 3 (\bar{2}11)/(255)[011]$, $\Sigma 9 (\bar{2}11)/(\bar{2}55)[011]$, в которых отсутствуют дефекты координации, т.е. все атомы находятся в тетраэдрическом окружении.
2. В ряду возможных конфигураций нейтральной вакансии на наклонных МЗГ имеются следующие корреляционные зависимости: по мере убывания энергии сегрегации локальные уровни вакансии в запрещенной зоне смещаются по энергии к зоне проводимости. Для наиболее энергетически выгодных конфигураций при энергиях сегрегации от -1.2 эВ и ниже данные уровни сдвигаются в зону проводимости и становятся квазилокальными. Одновременно с этим происходит уменьшение наименьших парных расстояний между атомами тетраэдрического окружения вакансии.
3. Существует корреляция между энергиями сегрегации примесей углерода, фосфора, а также вакансии на межзеренной границе и параметрами $\eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4$, характеризующих геометрию ближайшего тетраэдрического окружения атома, замещаемого дефектом. Линейные по параметрам η_{1-4} аппроксимирующие функции для энергии сегрегации перечисленных дефектов позволяют полуколичественно оценивать данные энергии, опираясь лишь на пространственное строение границы.

Достоверность полученных результатов определяется:

1. корректным использованием математических методов;
2. совпадением полученных результатов с экспериментальными и теоретическими данными других авторов в тех случаях, где сравнение возможно;
3. публикацией статей в реферируемых научных журналах;

4. апробацией основных научных результатов на международных и всероссийских научных конференциях и семинарах.

Объект исследования – межзеренные границы в кристаллическом кремнии.

Практическая значимость работы.

Линейные по параметрам η_{1-4} аппроксимирующие функции для энергии сегрегации рассмотренных дефектов позволяют полуколичественно оценивать данные энергии, опираясь лишь на знание пространственного строения границы. Приближенные энергии сегрегации, полученные с помощью таких функций, можно использовать для:

- Анализа равновесного распределения примесей в поликристалле;
- Определения типов границ, активно захватывающих данную примесь;
- Моделирования диффузии примесей как в плоскости границы так и через нее кинетическим методом Монте-Карло;
- Прочих вариантов многомасштабного моделирования поликристалла с границами.

Апробация работы и публикации.

Материалы работы докладывались и обсуждались на Молодежной конференции “Современные проблемы геохимии” (Иркутск, 2009); 14^{ой} Международной конференции “Спектроскопия высокого разрешения” (Листвянка, 2009); 7^{ой} Международной конференции “Кремний 2010” (Нижний Новгород, 2010); 12^{ой} Международной школе-семинаре по люминесценции и лазерной физике “ЛЛФ-2010” (Иркутск, 2010); Международной конференции “ $\Psi_k - 2010$ ” (Берлин, 2010).

Личный вклад соискателя в опубликованных статьях. Печатные работы, представленные диссертантом, основаны на теоретических результатах, в существен-

ной мере полученных лично автором, и интерпретированных как лично им, так и вместе с соавторами.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается выбор темы исследования и ее актуальность, ставится цель работы, и аннотируются основные решаемые задачи. Кратко излагается содержание работы, и формулируются основные положения, выносимые на защиту.

В главе 1 описаны методы расчета, используемые в работе. Поиск оптимальной структуры границы – это по сути поиск экстремума функции. Такая задача обычно решается с помощью алгоритмов типа Ньютона-Рафсона или сопряженных градиентов. Однако данные алгоритмы непригодны для поиска заранее неизвестной сложной структуры, так как если полная энергия имеет множество минимумов, то такие алгоритмы найдут лишь минимум, ближайший к начальной точке. Если есть минимумы, лежащие ниже по энергии, но путь к ним лежит через энергетический барьер, то они будут проигнорированы. В этом случае хорошо себя показывает генетический алгоритм. Главное его достоинство в том, что он перебирает случайным образом множество всех возможных конфигураций, для которых вычисляет целевую функцию, в нашем случае энергию границы. Наилучшие (обладающие низкой энергией) конфигурации он «скрещивает», то есть комбинирует, строя таким образом новые наборы конфигурации. Именно случайный выбор точек конфигурационного пространства служит залогом того, что если в процессе поиска участвуют несколько минимумов, среди них будет выбран наилучший или близкий к таковому, а механизм «скрещивания» обеспечивает сохранение уже найденных удачных (то есть обладающих низкой энергией) фрагментов структуры. Совмещение генетического алгоритма с методом сопряженных градиентов на промежуточных этапах позволило ускорить сходимость расчета.

Расчеты сегрегации вакансии, фосфора и бора требуют применения *ab initio* методов, так как эмпирические потенциалы давали бы некорректные значения

сил, действующих на атомы, в неоднородном поле деформации границы. В работе используются подходы теорий функционала плотности и псевдопотенциала, краткий обзор которых приведены в данной главе.

В главе 2 представлены результаты теоретического исследования границ. Представлен генетический алгоритм, реализованный автором работы с использованием условий, взятых из статьи [11]. Суть реализации состоит в том, что был создан комплекс программ, выполняющих этапы генетического алгоритма. После каждого этапа полученные геометрии оптимизировались с использованием эмпирического потенциала Терсоффа [12] по методу сопряженных градиентов, реализованного в программе GULP [13]. Проверка работоспособности алгоритма была проведена на границах $\Sigma 3$ ($\bar{2}\bar{1}1$)[011], $\Sigma 5$ (130)[001] и $\Sigma 29$ (520)[001]. Данные границы известны в литературе и достаточно изучены, и наши результаты для них согласуются с результатами других авторов. После получения соответствия геометрии и энергии границы, был произведен поиск структур произвольно выбранной специальной границы. Моделирование границ кручения из-за большого количества атомов потребовало бы значительных компьютерных ресурсов. Поэтому было принято решение ограничиться границами наклона. Был построен список всех возможных асимметричных наклонных границ, из которого были выбраны границы, модели которых не содержали бы большого количества атомов. Такими границами оказались $\Sigma 3$ ($\bar{2}11$)/(255)[011], $\Sigma 9$ ($\bar{2}11$)/($\bar{2}55$)[011], $\Sigma 13$ (7 9 0)/(3 11 0)[001]. На рисунке 1 представлены геометрии выбранных границ после оптимизации.

Энергии этих границ (см табл. 1) оказались ниже энергии границы между аморфным и кристаллическим кремнием ($1.7 J/m^2$) и ниже энергии скола монокристалла кремния по плоскостям (100) и (110), 1.2 и $1.5 J/m^2$ соответственно. Анализ структуры показал, что все атомы 4-х координированы, а изменение длин связей меньше 4%.

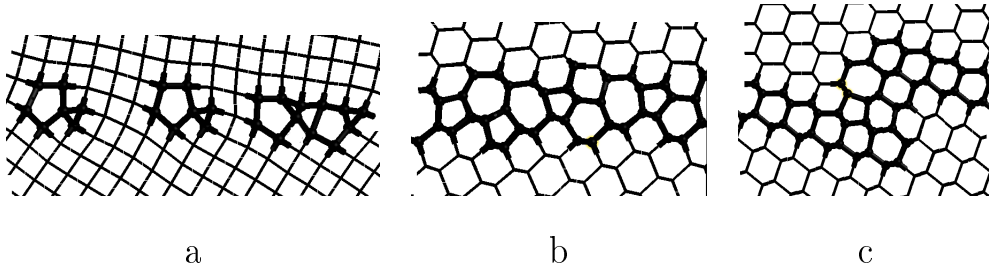


Рис. 1: Полученные структуры границ, а) $\Sigma 13(7\ 9\ 0)/(3\ 11\ 0)[001]$, б) $\Sigma 9(\bar{2}11)/(\bar{2}55)[011]$, в) $\Sigma 3(\bar{2}11)/(255)[011]$

В главе 3 представлены расчеты сегрегации точечных дефектов на границах, а также электронная структура таких систем. Для энергии сегрегации дефекта D мы используем следующее определение:

$$E_{seg}(D) = E_{tot}(GB + D) - E_{tot}(Bulk + D)$$

То есть, энергия сегрегации – это разность полных энергий кристалла с дефектом на границе и того же кристалла с тем же дефектом, но в объеме кристаллического зерна. Таким образом, отрицательная энергия сегрегации означает, что дефекту энергетически выгодно замещать данный узел границы.

Показано, что для расчета вакансии эмпирический потенциал Терсоффа не применим, т.к. не воспроизводит асимметричную деформацию окружения вакансии, возникающую вследствие эффекта Яна-Теллера. Применение эмпирических потенциалов для фосфора и бора также не эффективно, так как сложно учесть взаимодействие ионизированной примеси с неоднородным электрическим потенциалом, возникающим на границах. Поэтому энергии сегрегации атомов фосфора, бора, а также вакансии рассчитывались методом функционала плотности, реализованного в программном комплексе VASP [14–17]. Энергия сегрегация для атома углерода рассчитывалась с использованием эмпирического потенциала Терсоффа. Путем последовательного расчета энергии формирования

Таблица 1: Энергии исследованных границ

№	Σ	Плоскость { h k l }	Угол разориентации, θ°	Ось <hkl>	Тип границ	Энергия границы, J/m^2
1	5	1,3,0	36.89	0,0,1	симметричная	0.68
2	5	1,3,0	36.89	0,0,1	«	0.63
3	29	5,2,0	43.6	0,0,1	«	0.77
4	29	5,2,0	43.6	0,0,1	«	1.27
8	3	2,1,1	70.52	0,1,1	«	0.69
5	13	7,9,0/3,11,0	22.61	0,0,1	асимметричная	1.12
6	9	$\bar{2},5,5/\bar{2},1,1$	38.94	0,1,1	«	1.38
7	9	$\bar{2},5,5/\bar{2},1,1$	38.94	0,1,1	«	1.0
9	3	$\bar{2},5,5/2,1,1$	70.52	0,1,1	«	0.37

дефектов, замещающих различные граничные атомы, были получены карты распределения, примеры которых представлены на рисунке 2.

В литературе известны расчеты границ из первых принципов с целью найти глубокие уровни. Однако, таких уровней в границах не было найдено. Авторы таких работ связывают отсутствие глубоких уровней с отсутствием в расчетных моделях координационных дефектов. Проведенные в этой работе вычисления также не обнаруживают глубоких уровней, что подтверждают данную точку зрения. Причем, в диссертации показано, что при появлении вакансии на границе, глубокие уровни, связанные с ней, смещаются по направлению зоны проводимости. Если вакансию занимает наиболее выгодное место, то в запрещенной зоне других уровней кроме мелких нет (см рис. 3).

На рисунке 3 представлена плотность состояний вакансии, расположенной на границе $\Sigma 29$ (520)[001] в четырех различных позициях. Просматривается

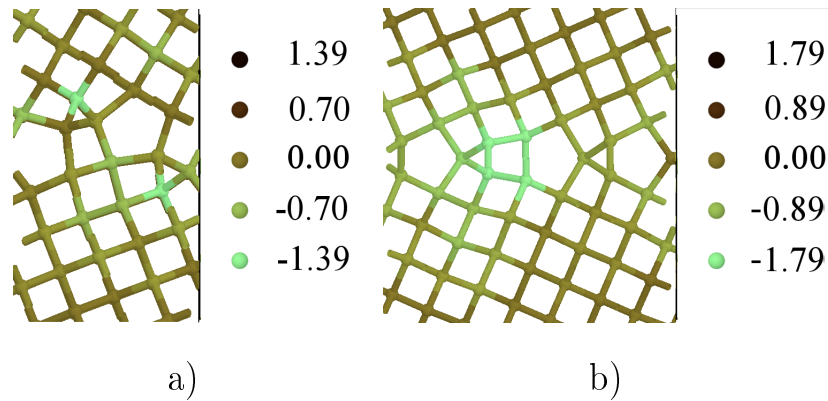


Рис. 2: Карты сегрегации вакансии на границах а) $\Sigma 5$ (130)[001] и б) $\Sigma 29$ (520)[001].

следующая простая закономерность: чем больше по абсолютной величине энергия сегрегации, тем ближе связанные с вакансией локальные уровни смещаются к зоне проводимости кристалла. В самом выгодном положении энергия сегрегации вакансии составляет -1.80 эВ и ее локальные уровни оказываются уже в самой зоне проводимости, становясь таким образом квазилокальными. В главе показано, что при таком расположении близлежащие к вакансии атомы попарно смещаются друг к другу на расстояние 2.5 \AA , т.е. почти на расстояние ковалентной связи. Поэтому становится понятно отсутствие глубоких уровней в этом положении вакансии. В плотности электронных состояний бора и фосфора никаких особенностей не выявлено, на краях зоны проводимости присутствуют мелкие квазилокальные уровни.

Из рисунка 2 становится понятно, что имеется какая-то корреляция между энергией сегрегации дефекта и локальной геометрией узла, в который помещается дефект. В главе 4 делается попытка выразить эту корреляцию. Для этого было предположено, что существенным для нее является только тетраэдрическое окружение узла, т.е. узел и четыре ближайших соседа. Такое предположение оправдано, по крайней мере, для тех дефектов, которые не создают локализованных электронных состояний и распространяющегося далеко поля

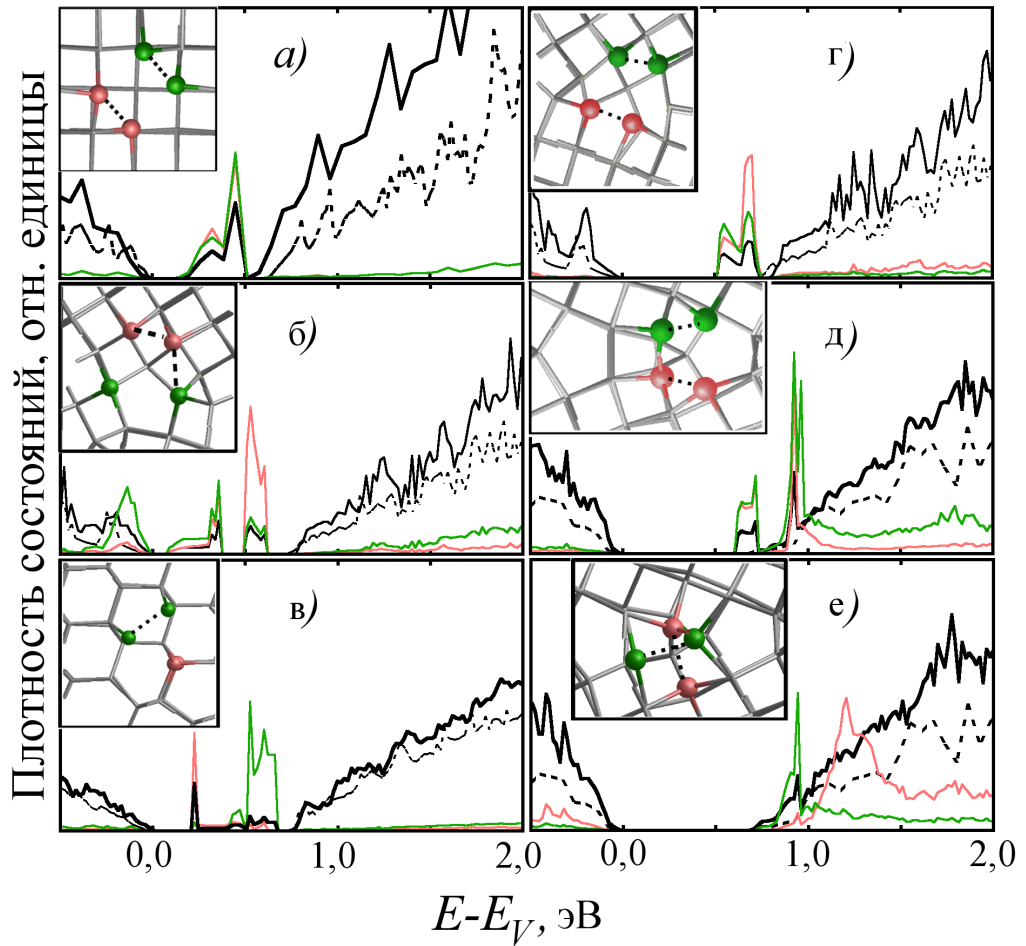


Рис. 3: Плотность электронных состояний для вакансии, расположенной в различных позициях на границе с энергиями сегрегации а) 0.00 эВ; б) 0.20 эВ; в) -0.16 эВ; г) -0.69 эВ; д) -1.18 эВ; е) -1.80 эВ. Тонкие линии соответствуют плотности состояний, спроектированных на атомы ближайшего окружения вакансии. Штриховыми линиями обозначены наименьшие парные расстояния.

деформации решетки.

Обозначим положения четыре соседних узлов относительно данного узла $\mathbf{r}_i (i = 1..4)$. Вместе вектора \mathbf{r}_i образуют 12-мерный вектор, полностью характеризующий ориентацию и деформацию тетраэдра. 12-мерное пространство таких векторов может быть разложено на подпространства, преобразующиеся по неприводимым представлениям группы тетраэдра T_d следующим образом: $A_1 + E + T_1 + 2T_2$. Компонента T_1 чисто вращательная и не имеет отноше-

ния к деформации тетраэдра. Что до остальных компонент, то норма проекции вектора деформации на каждое из этих подпространств - это инвариантный параметр, характеризующий деформацию определенного типа. Таким образом мы построили следующий набор параметров:

$$\begin{aligned}\eta_1 &= \frac{V}{V_0} = \frac{1}{6V_0}[\mathbf{r}_{12}\mathbf{r}_{13}\mathbf{r}_{14}] \\ a^4\eta_2^2 &= \frac{1}{4}\sum_i r_i^4 - \left(\frac{1}{4}\sum_i r_i^2\right)^2 \\ a^4\eta_3^2 &= (S_{12} - S_{34})^2 + (S_{13} - S_{24})^2 + (S_{14} - S_{23})^2 \\ a^4\eta_4^2 &= (\mathbf{r}_{12}\mathbf{r}_{34})^2 + (\mathbf{r}_{13}\mathbf{r}_{24})^2 + (\mathbf{r}_{14}\mathbf{r}_{23})^2\end{aligned}$$

Где a - это длина связи Si-Si в идеальном кристалле, $V_0 = \frac{8a^3}{9\sqrt{3}}$ - объем тетраэдра в идеальном кристалле,

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_{ij} &= \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i \\ S_{ij} &= r_i^2 + r_j^2 - 6\mathbf{r}_i\mathbf{r}_j\end{aligned}$$

Первый параметр представляет собой относительный объем тетраэдра (нормированный на V_0), соответствует представлению A_1 и характеризует изотропную деформацию тетраэдра. Параметр η_2 соответствует представлению T_2 и характеризует анизотропное изменение длин связей с ближайшими соседями, а параметры η_3 и η_4 (представления T_2 и E) - угловую деформацию, т.е. изменение углов между связями.

Мы аппроксимировали энергию сегрегации всех исследованных дефектов линейной по параметрам η_{1-4} функцией:

$$E_{seg}(\eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4) = a(\eta_1 - 1) + b\eta_2 + c\eta_3 + d\eta_4 + E_{S0} \quad (1)$$

Путем подгонки по методу наименьших квадратов обнаружено, что от типа границы корреляция для выбранного дефекта не зависит. То есть, один и тот

же набор параметров a, b, c, d работает для данного дефекта на различных наклонных границах. Ниже приведена таблица 2 коэффициентов для функции (1). Прочерки в таблице означают, что корреляция не выявлена. На рисунке 4 представлен пример корреляции для вакансии.

Этот результат представляет, на наш взгляд, значительный интерес и является обнадеживающим. Вполне возможно, что приближенная формула 1 с теми же параметрами окажется применима не только к наклонным, но также и к двойниковым и к скрученным границам. Не исключена ее применимость к дислокациям и даже к кремнию с аморфной структурой. Данные предположения, разумеется, нуждаются в проверке, но если они окажутся верными, то в наших руках оказывается простая модель, позволяющая оценивать энергии сегрегации дефектов без каких-либо затрат вычислительных ресурсов. Это позволит анализировать равновесное распределение дефектов в поликристалле, моделировать кинетику их миграции, определять, на каких границах данные дефекты могут скапливаться, одним словом, значительно приблизит нас к моделированию реального, а не идеального поликристалла и пониманию происходящих в нем процессов.

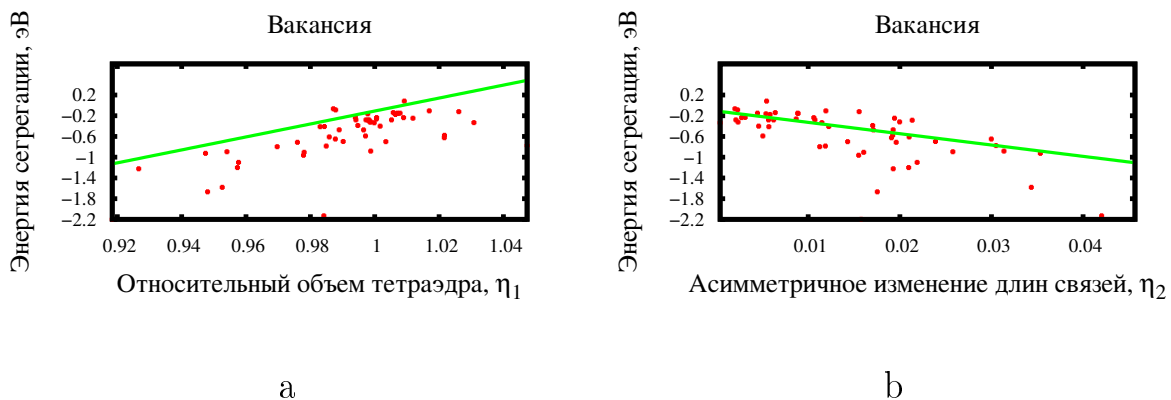


Рис. 4: Корреляция энергии сегрегации вакансии и параметров а) η_1 , б) η_2

В заключении сформулированы основные научные результаты диссертации.

Таблица 2: Таблица параметров аппроксимирующей функции. Все параметры в приведены в эВ. В скобках указаны относительная ошибка подгонки.

Дефект	a	b	c	d	E_{S0}
Вакансия	11.2 (12%)	-17.6 (20%)	—	—	0.07 (75%)
P	4.2 (4%)	-11.0 (15%)	0.13 (23%)	—	-0.02 (162%)
C	13.9 (6%)	-12.6 (15%)	—	0.9 (8%)	-0.03 (105%)
B	6.5 (6%)	—	—	0.4 (10%)	0.19 (8%)

Основные результаты.

1. В ходе работы был программно реализован алгоритм для оптимизации сложных структур.
2. Найдены модели произвольных наклонных границ без координационных дефектов.
3. Введены локальные характеристики деформации тетраэдрического окружения граничного атома – параметры η_1 , η_2 , η_3 , η_4 .
4. Построены корреляции этих параметров и энергий сегрегации примесей углерода, фосфора, а также вакансии.
5. Установлено отсутствие глубоких уровней, связанных с нейтральной вакансией, при нахождении ее на границе в энергетически выгодных позициях.

ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ДИССЕРТАЦИИ
ОПУБЛИКОВАНЫ

В СЛЕДУЮЩИХ РАБОТАХ

Публикации в изданиях, рекомендованных ВАК

1. Лазебных В.Ю. Теоретическое моделирование структуры границ наклона в кристаллическом кремнии / Лазебных В.Ю., Мысовский А.С. // СПб: Физика твердого тела. - 2012. - Том 54. - С. 2232-2237.
2. Лазебных В.Ю. Исследование из первых принципов распределение точечных дефектов на межзеренных границах в кристаллическом кремнии / Лазебных В.Ю., Мысовский А.С. // Письма в ЖЭТФ. - 2013. - Том. 98. - №2 - С. 84-87.

Публикации в других изданиях

3. Лазебных В.Ю. Теоретическое исследование влияния межзеренных границ на кинетику носителей заряда в кремнии. Сборник тезисов “7 Международной конференции и 6 школы молодых ученых “Кремний-2010” / Лазебных В.Ю., Мысовский А.С.// Н. Новгород: 2010.– С. 213.
4. Лазебных В.Ю. Влияние межзеренных границ на рекомбинацию носителей заряда в мультикремнии. Сборник тезисов докладов “XII международной школы-семинара по люминесценции и лазерной физике ЛЛФ-2010” / Лазебных В.Ю., Мысовский А.С. // Иркутск: 2010. – С. 125.
5. Lazebnykh V.Yu. Electronic structure of the grain boundaries in multi-Si and their influence on the recombination of charge carriers. Abstracts of Ψ_k Conference 2010 / Lazebnykh V.Yu., Mysovsky A.S. // Berlin: 2010, p. 320.

Литература

- [1] Chan Tzu-Liang. Limits on Passivating Defects in Semiconductors: The Case of Si Edge Dislocations / West D., Zhang S. B.. // Physical Review Letters. - Vol. 107. - P. 035503-035507.
- [2] Cleri F. Correlation between atomic structure and localized gap states in silicon grain boundaries / Cleri F., Keblinski P., Colombo L et al. // Physical Review B. - 1998. - Vol. 57. - P. 6247-6250.
- [3] von Alfthan S. Are the Structures of Twist Grain Boundaries in Silicon Ordered at 0 K? / von Alfthan S., Haynes P.D., Kaski K., and Sutton A. P // Physical Review Letters. - 2006. - Vol. 96. - P. 055505-1 – 055505-4.
- [4] Kutsukake K. Influence of structural imperfection of $\Sigma 5$ grain boundaries in bulk multicrystalline Si on their electrical activities / Kutsukake K., Usami N., Fujiwara K., et al. // Journal of Applied Phisics. - 2007. - Vol. 101. - P. 063509-1 - 063509-5.
- [5] O. Rallon. Influence of carbon and hydrogen segregation on the electrical properties of grain boundaries in polycrystalline silicon sheets / Rallon O., Autcouturier M., Texier-Hervo C., Mautref M., Belouet C. // Solar Cell. 1983. -Vol. 9. - P. 149.

- [6] Bourret A. Early stages of oxygen segregation and precipitation in silicon / Bourret A., Thibault J., Seidman D.M. // Journal of Applied Physics. - 1984. - Vol. 55. - P. 825-836.
- [7] Herbeuval I. Influence de la structure intercrystalline sur la diffusion du zinc dans des joints symetriques de flexion de l'aluminium / Herbeuval I. Biscondi M., Goux C. // Mémoires Scientifiques Rev. Metallurg. - 1973. - Vol. LXX. - N°1. - P. 39-46.
- [8] Arias T. A. Electron trapping and impurity segregation without defects: Ab initio study of perfectly rebonded grain boundaries / Arias T. A., Joannopoulos J. D. // Physical Review B. - 1994. - Vol. 49. - P. 4525-4531.
- [9] Shi T.T. First-principles study of iron segregation into silicon $\Sigma 5$ grain boundary / Shi T.T., Li Y.H., Ma Z. Q., G. H. Qu, Hong F. // Journal of Applied Physics. - 2010. - Vol. 107. - P. 093713.
- [10] Feng C.B. Structure and effects of vacancies in $\Sigma 3$ (112) grain boundaries in si / Feng C.B., Nie J.L., Zu X.T. et al // Journal of applied physics. - 2009. - Vol. 106. - P. 113506-1 – 113506-4.
- [11] Jian Zhang. Finding the low-energy structures of Si[001] symmetric tilted grain boundaries with a genetic algorithm / Jian Zhang, Cai-Zhuang Wang, and Kai-Ming Ho. // Zhang Jian. Physical Review B. - 2009. - Vol. 80. - P. 174102-1 – 174102-6.
- [12] Tersoff J. Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties / Tersoff J. // Physical Review B - 1988. - Vol. 38. - P. 9902-9905.
- [13] Gale J.D. The General Utility Lattice Program / Gale J.D., Rohi A.L. // Molecular Simulation. - 2003. - Vol. 29. - P. 291-241.

- [14] G. Kresse. Ab initio molecular dynamics for liquid metals / G. Kresse, J. Hafner
// Physical Review B. - 1993. - V. 47. - P. 558.
- [15] G. Kresse. Ab initio molecular-dynamics simulation of the liquid-metal-
amorphous-semiconductor transition in germanium / G. Kresse and J. Hafner
// Physical Review B. - 1994. - V. 49. - P 14251.
- [16] G. Kresse. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and
semiconductors using a plane-wave basis set / G. Kresse and J. Furthmüller
// Computational Material Science. - 1996. - V. 6. - P. 15.
- [17] G. Kresse. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using
a plane-wave basis set / G. Kresse and J. Furthmüller // Physical Review B. -
1996. - V. 54. - P. 11169.

Подписано к печати 21.11.2013 г.

Формат 60*84/16. Объем 1,4 п.л. Тираж 100 экз. Заказ №721.

Издательство Института географии им. В.Б. Сочавы СО РАН

664033 г. Иркутск, ул. Улан-Баторская, 1.