*На правах рукописи*

Мозжерин Александр Владимирович

**Особенности формирования структурных дефектов в полупроводниках A2B6, кремнии, германии и арсениде галлия с учетом влияния энергии дефекта упаковки**

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Иркутск, 2014

Работа выполнена в лаборатории электронной микроскопии центра коллективного пользования и кафедры физики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Сибирский государственный аэрокосмический университет имени академика М.Ф.Решетнева».

|  |  |
| --- | --- |
| **Научный руководитель:** | доктор физико-математических наук, профессор, **Логинов Юрий Юрьевич** |
| **Официальные оппоненты:** | **Мисюль Сергей Валентинович**  доктор физико-математических наук, профессор, кафедра физики твердого тела и нанотехнологий  ФГАОУ ВПО «Сибирский федеральный университет»  **Сорокин Анатолий Васильевич**  кандидат физико-математических наук, доцент, старший научный сотрудник ФГБУН «Института физики им. Л.В. Киренского» Сибирского отделения Российской академии наук (ИФ СО РАН) |
| **Ведущая организация:** | Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Сибирский государственный технологический университет» |

Защита состоится « 5 » марта 2014 г. в 900 на заседании диссертационного совета

Д 212.074.04 при ФГБОУ ВПО «Иркутский государственный университет» по адресу: 664003, Иркутск, бульвар Гагарина, 20.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке ФГБОУ ВПО «Иркутский государственный университет»

Автореферат разослан «\_\_\_\_ » 2014 г.

Ученый секретарь

Диссертационного совета Д 212.074.04

канд. физ.-мат. наук, доцент \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Б.В. Мангазеев

**ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ**

**Актуальность темы.** Структурные дефекты кристаллов во многом определяют их электрические, оптические и магнитные свойства. В отличие от Si, Ge и GaAs материалы А2В6 характеризуются низкой энергией дефекта упаковки (ЭДУ), что обуславливает определенные особенности в процессах дефектообразования. Исследование особенностей формирования структурных дефектов в монокристаллах полупроводников группы A2B6, кремнии, германии и арсениде галлия с учетом ЭДУ обусловлено необходимостью изучения влияния структурных дефектов на свойства этих материалов, а также определении их дефектостойкости. Данная группа полупроводников имеет исключительно важное значение, поскольку они являются основными материалами современной полупроводниковой электроники и солнечной энергетики. Производство устройств и элементов на их основе в значительной мере определяет уровень развития высокотехнологических отраслей промышленности, систем коммуникации и национальной безопасности.

Параметр ЭДУ связан с переходом частичных дислокаций Франка и Шокли в полные дислокации с вектором Бюргерса b = a/2<110>, поэтому актуальным является не только вычисление ЭДУ в исследуемых материалах, а также расчет «критических» радиусов дислокационных петель (rcr), образованных частичными дислокациями, при увеличении которого (r > rcr) происходит переход частичных дислокационных петель в полные (например, при термоотжиге) и определение плотности дефектов в этих материалах, как ключевых параметров дефектостойкости.

Особенно актуальным является установление универсальной зависимости плотности, разнообразия и размеров дефектов от ЭДУ. Определенные успехи установления этой зависимости были показаны в ряде работ в металлах, однако, на полупроводниках такие исследования практически не проводились.

Стоит также отметить, что установление критериев стойкости изучаемых стратегических материалов к образованию структурных дефектов по величине ЭДУ, позволит определить границы их использования, что носит огромное прикладное и фундаментальное значение.

**Предметами исследования** являются закономерности в эволюции структурных дефектов в полупроводниковых материалах A2B6, кремнии, германии и арсениде галлия в зависимости от величины ЭДУ.

**Объектом исследования**  являются монокристаллы кремния, германия, арсенида галлия, сульфида цинка, сульфида кадмия, селенида цинка, теллурида цинка, теллурида кадмия.

**Цель работы**: изучение особенностей образования структурных дефектов в полупроводниках группы A2B6, кремнии, германии и арсениде галлия и установление корреляции дефектообразования с величиной энергии дефекта упаковки.

Для достижения поставленной цели решались следующие **задачи**:

1. Исследование закономерностей дефектообразования в легированных и нелегированных полупроводниковых материалах с различными значениями энергии дефекта упаковки методами просвечивающей электронной микроскопии с предварительной пробоподготовкой образцов усовершенствованными методами.
2. Вычисление энергии дефекта упаковки, выявление способов контроля стойкости полупроводниковых материалов к образованию дефектов с установлением роли ЭДУ в этих процессах.
3. Разработка оптимальных методов контроля структурных дефектов в солнечных элементах.
4. Интерпретация полученных результатов на основе модельных представлений и объяснение механизма взаимосвязи степени дефектообразования от ЭДУ материалов.

Электронно-микроскопические методы, в том числе и метод высокоразрешающей электронной микроскопии (ВРЭМ), с применением электронно-зондового анализа позволяют на современном уровне выполнять поставленные задачи.

**Научная новизна работы.** В ходе выполнения диссертационного исследования впервые получены данные по «критическим» радиусам дислокационных петель в полупроводниковых материалах: кремнии, германии, арсениде галлия, сульфиде цинка, сульфиде кадмия, селениде цинка, теллуриде цинка, теллуриде кадмия, с учетом энергии дефекта упаковки.

На основе теоретические расчетов «критических» радиусов дислокационных петель, после которых происходит переход частичных дислокационных петель в полные дислокационные петли, и экспериментальных электронно-микроскопических исследований структурных дефектов установлена прямая зависимость эволюции дефектов от величины ЭДУ в изучаемых полупроводниках. Показано, что в последовательности Si → Ge ≈ GaAs → ZnTe → CdTe → ZnSe ≈ CdS → ZnS с уменьшением ЭДУ происходит бурное развитие дефектной сети, повышается интенсивность эволюции вторичных дефектов, происходит увеличение плотности и размеров дефектов, появляются новые типы дефектов, происходит активное взаимодействие дефектов друг с другом в массиве кристалла.

Установлено, что значение ЭДУ в материалах, является показателем его стойкости к дефектообразованию.

Разработан экспресс-метод диагностики микродефектов в кремниевых солнечных элементах с помощью микроплазм.

**Основные научные положения, выносимые на защиту:**

* «Критические» радиусы дислокационных петель в материалах с различным значением энергии дефекта упаковки, характеризующие переход частичных дислокационных петель в полные дислокационные петли, можно рассматривать как параметр дефектостойкости материалов.
* С ростом ЭДУ увеличивается стойкость полупроводников к образованию дефектов, уменьшается плотность и размеры дефектов. При уменьшении ЭДУ происходит более интенсивная эволюция вторичных дефектов, появляются новые типы дефектов, увеличивается плотность дефектов и их размеры.
* Контроль интенсивности и количества микроплазм, возникающих на лицевой поверхности солнечных элементов при увеличении приложенного к p-n-переходу обратного напряжения, можно использовать как экспресс метод обнаружения микродефектов и оценки качества солнечных батарей.

**Теоретическая и практическая значимость.** Закономерности формирования структурных дефектов в полупроводниковых кристаллах могут быть использованы для совершенствования технологии получения материалов и структур с заданными свойствами, решения задач управления типом, плотностью и пространственным распределением дефектов кристаллического строения, что важно для реализации предельных параметров устройств микроэлектроники.

Знание зависимости эволюции дефектов от значения ЭДУ, поможет в синтезе соединений с заданными свойствами.

Полученные в работе данные о процессах формирования дефектов в полупроводниках могут применяться при анализе причин деградации и прогнозировании надежности изделий электронной техники, применяемой в производстве космических аппаратов на ОАО «Информационные спутниковые системы имени академика М.Ф.Решетнева» - базовом предприятии Сибирского государственного аэрокосмического университета, в котором выполнена данная работа.

**Достоверность и обоснованность результатов** обеспечивается использованием самых современных экспериментальных методов просвечивающей электронной микроскопии, методик пробоподготовки образцов, включающих в себя новейшие усовершенствованные методы, обеспечивающие практически отсутствующее внешнее воздействие на изучаемый материал в процессе исследования. Достоверность также подтверждается проведением теоретического расчета и сравнение с результатами экспериментального исследования, которые показывают хорошую согласованность.

**Личный вклад автора в получении научных результатов.** Выбор направления исследований, формулировка задачи, обсуждение экспериментальных и теоретических результатов и их интерпретация проводилась совместно с научным руководителем Ю.Ю. Логиновым. Основные результаты диссертации получены автором самостоятельно. Электронно-микроскопические исследования полупроводниковых материалов и теоретический расчет «критических» дислокационных петель и энергии дефекта упаковки, проводились автором самостоятельно.

**Апробация работы.** Основные результаты, представленные в диссертации, докладывались и обсуждались на научных конференциях и семинарах различного уровня: на XIII– ХV Международных научных конференции, посвященной памяти генерального конструктора ракетно-космических систем академика М.Ф. Решетнева (г. Красноярск, 2009-2011г.); Юбилейной X Всероссийской Школа–семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества Институт физики металлов УрО РАН (г. Екатеринбург 2009 г.); XV Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых учёных ВНКСФ-15 (г. Кемерово-Томск 2009 г.); XVII Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых учёных ВНКСФ-17 (г. Екатеринбург 2011г.); XLVII Международной научной студенческой конференции «Студент и научно-технический прогресс», Новосибирский государственный университет (г. Новосибирск 2009 г.); Региональной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых НКСФ-XXXVIII (г. Красноярск 2009 г.); **VII Всероссийской научно–технической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, посвященной 50–летию первого полета человека в космос, Сибирский федеральный университет (г. Красноярск 2011 г.);** VIII Всероссийской научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, посвященной 155-летию со дня рождения К.Э.Циолковского, **Сибирский федеральный университет (г. Красноярск 2012 г.).**

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано 18 работ, из них 7 статей в научных изданиях, входящих в перечень ВАК.

**Структура и объем диссертации.** Диссертационная работа состоит из введения, четырёх глав, заключения и списка литературы. Работа содержит 134 страницы машинописного текста, проиллюстрирована 10 таблицами и 45 рисунком. Список литературы включает 116 наименований.

**СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

**Во введении** дано обоснование актуальности выбранной темы, сформулированы основные цели и задачи работы, научная новизна и защищаемые положения, приведены данные по практической значимости исследования.

**В первой главе,** которая носит обзорный характер, приведены литературные данные по исследованию эволюции структурных дефектов в металлах, сплавах и полупроводниках. Выявлены закономерности зависимости развития дефектной сети в металлах и сплавах от энергии дефекта упаковки, отмечено недостаточное изучения роли ЭДУ в полупроводниковых материалах. По результатам литературного обзора, были выявлены ряд моментов, определивших цели и задачи диссертационного исследования.

Рассмотрены основные результаты научных работ, изучающих роль ЭДУ в образование дефектной сети в металлах и сплавах, а также её влиянии на свойства металлов и сплавов, подвергавшимся внешнему воздействию.

Описаны результаты ряда работ по изучению механизмов формирования структурных дефектов в полупроводниковых материалах и гетероэпитаксиальных структурах, особое внимание было уделено взаимосвязи этих процессов с энергией дефекта упаковки.

**Вторая глава** посвящена методики исследования и анализа структурных дефектов в изучаемых полупроводниках.

Исследовались монокристаллы кремния, германия, арсенида галлия, сульфида цинка, сульфида кадмия, селенида цинка, теллурида цинка, теллурида кадмия методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Для предотвращения дефектообразования использовались самые современные методы подготовки образцов для ПЭМ-исследований, включавшие в себя подготовку образца необходимой формы и толщины с использованием на заключительном этапе ионного травления. Нами был внедрен метод ионного травления материалов с помощью установки PIPS (Precision Ion Polishing System, Gatan) (рис. 1). Образцы кремния и германия практически не чувствительны к иному травлению и могут протравливаться при углах до 10° и ускоряющем напряжении 5-6 кэВ. А вот для образцов класса А2В6 (CdTe, ZnS, ZnSe и др.) обнаружено, что ионное травление может сопровождаться радиационными повреждениями поверхностных слоев, а также внесением в образец большого количества дефектов, которые существенно изменяют ростовую дефектную сеть образца. Дефектообразование при травлении существенно снижается, если используется реактивное ионное распыление с низким ускоряющим напряжением. Нами был апробирован метод травления образцов класса A2B6 с использованием более низких энергий (около 3-4 кэВ), чем для кремния и германия (5-6 кэВ), а по мере появления отверстия, на установки PIPS уменьшался угол (до 4-5°) и ускоряющее напряжение (до 2-3 кэВ). При данных условиях травление протекало в течение 3-5 минут. Этот усовершенствованный метод способствовал резкому снижению внедренных дефектов и исключению радиационного повреждения поверхностного слоя.



|  |  |
| --- | --- |
| а | б |
| Рис.1. Ионное травление образцов. а – установка Precision Ion Polishing System (PIPS), Gatan; б – образец после ионного травления | |

Описаны методики работы на просвечивающем электронном микроскопе JEOLJEM-2100 и идентификации структурных дефектов. Применялись методы темнопольного и светопольного изображения в ПЭМ, определялись плотность, размеры и виды структурных дефектов в исследуемых материалах.

Рассмотрены основные методы определения ЭДУ в материалах: классические – определение ЭДУ по ширине полосок дефекта упаковки или растянутым узлам и современный метод – определение ЭДУ по частичным дислокационным петлям.

**В третьей главе** изложено исследование влияния структурных дефектов на солнечные элементы. Поскольку данная категория материалов использует в своем составе полупроводниковые материалы группы A2B6, кремний и германий, и имеет исключительно важное значение во многих наукоёмких областях, для понимания роли ЭДУ в данных полупроводниках необходимо изучить некоторые особенности формирования дефектов в группе солнечных элементов.

Описаны результаты наших исследований по лавинному умножению и излучательной рекомбинации носителей тока в кремниевых солнечных элементах. Солнечные элементы широко используются в качестве источников энергии, в том числе энергетических платформ космических аппаратов. В обратно смещенных p-n-переходах, расположенных у поверхности полупроводника (как, например, в светодиодах и в солнечных элементах), в предпробойных электрических полях наблюдаются светящиеся точки и пятна, вызванные микроплазмами. Микроплазменный пробой, происходящий в обратно-смещенных *p-n-*переходах, сильно локализован, не превышает 1 мкм в диаметре и сопровождается свечением невысокой интенсивности.

На рис. 2 представлены типичные фотоснимки микроплазм на поверхности солнечных элементов при возрастающих обратных напряжениях. Причиной возникновения микроплазм могут служить неоднородности *p-n-*переходов, связанные со структурными дефектами в этой области полупроводника, например, дислокациями. Во-первых, в районе дислокации имеются области сжатия и растяжения кристаллической решетки. В области сжатия (растяжения) вблизи дислокаций ширина запрещенной зоны может уменьшиться на 0,2-0,4 эВ. Так как пороговая энергия ионизации принимается пропорциональной ширине запрещенной зоны, то ее уменьшение вблизи дислокаций должно привести к увеличению коэффициентов ионизации носителей и, следовательно, к микроплазменному пробою. Во-вторых, дислокации в кристаллах являются центрами осаждения примесей, которые могут формировать примесные атмосферы вокруг дислокаций или в результате распада пресыщенного твердого раствора - выделения второй фазы. Наличие примесных атмосфер легирующих примесей должно приводить к локальному изменению области пространственного заряда и к увеличению напряженности поля в местах пересечения *p-n-*перехода дислокацией. Выделения второй фазы могут является серьезнейшей причиной, способствующей понижению напряжения пробоя *p-n-*перехода. В-третьих, вдоль дислокаций могут быть повышены коэффициенты диффузии примесей, что также может привести к резкому понижению напряжения пробоя.



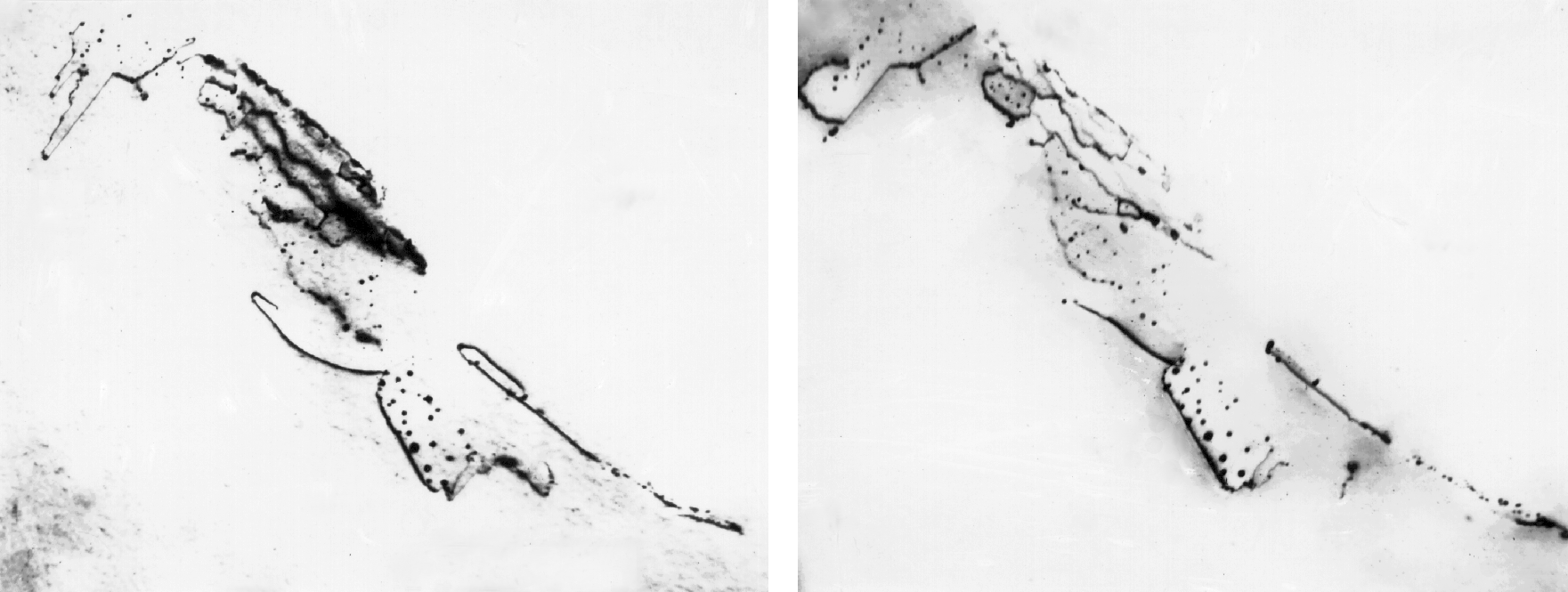
а

б

в

Рис. 2. Увеличение интенсивности и числа микроплазм в кремниевом солнечном элементе при повышении напряжения: а – 7 В; б – 8 В; в – 10 В

На рис. 3 показаны дислокации и примесные преципитаты, образовавшиеся в кремнии в области *p-n-*перехода.



0,1 мкм

Рис.3. Электронно-микроскопическое изображение примесных выделений на дислокациях в кремнии в области *p-n-*перехода

Полученные результаты анализа интенсивности и количества микроплазм, возникающих на лицевой поверхности солнечных элементов при увеличении приложенного к *p-n-*переходу обратного напряжения, позволяют использовать его как экспресс-метод обнаружения микродефектов и оценки качества солнечных батарей.

**Четвертая глава** посвящена изучению вопроса о стойкости к образованию дефектов в некоторых полупроводниках с учетом ЭДУ.

Описаны особенности дефектообразования в кремнии, германии, сульфиде цинка, сульфиде кадмия, селениде цинка, теллуриде цинка и теллуриде кадмия при термообработках. При изучении монокристаллов кремния в электронном микроскопе обнаружены структурные дефекты– дислокации и дислокационные стенки, практически краевых дислокаций, а также дефекты упаковки (рис. 4), При электронно-микроскопическом исследовании образцов германия обнаружено присутствие структурных дефектов, аналогичных кремнию: дислокаций, дислокационных стенок и дефектов упаковки (рис. 5). Однако их плотность была существенно ниже, чем в кремнии и составляла <104 см-2.

|  |  |
| --- | --- |
| 02 TEM x40000.jpg | E:\Наука\Si (06-03-2009)\06 TEM x25000.jpg |
| a | b |
| C:\Users\user.4-ПК\Desktop\МОЗЖЕРИН А.В\Научная работа\кремний для Саши\рис3а.bmpC:\Users\user.4-ПК\Desktop\МОЗЖЕРИН А.В\Научная работа\кремний для Саши\рис3б.bmp | |
| с | |

Рис. 4. Структурные дефекты в кремнии:

a–отдельная дислокация; b - cветлопольное изображение края дислокационной стенки практически краевых дислокаций, c–дефект упаковки

Полученные экспериментальные данные позволили произвести расчет ЭДУ для кремния и германия по методу ширины полосок дефекта упаковки.

|  |  |
| --- | --- |
| C:\Users\user.4-ПК\Desktop\МОЗЖЕРИН А.В\Научная работа\Фото, материалы для работы\02 (28-03-2010)\JPEG\03 Si_9.205 TEM x 100 000.jpg | C:\Users\КСЕ\Downloads\ДУ Ge.jpg |
| a | b |

Рис. 5 Структурные дефекты в германии

a – отдельная дислокация, b – дефект упаковки.

Определив из эксперимента расстояние между частичными дислокациями в полоске дефекта упаковки (d), находим d0 (формула 2), затем вычисляем ЭДУ (γ). Учитывая, что модуль сдвига (µsi) = 42.9·109 Па, (µGe) = 31.7·109 Па, коэффициент Пуассона (νSi) = 0.27, (νGe) = 0.31, в соответствии с (3) с учетом экстинционной длины получаем: γSi ≈ 5,5·10-2Дж/м2, γGe ≈ 9·10-2Дж/м2.

 (1)

где

 (2)

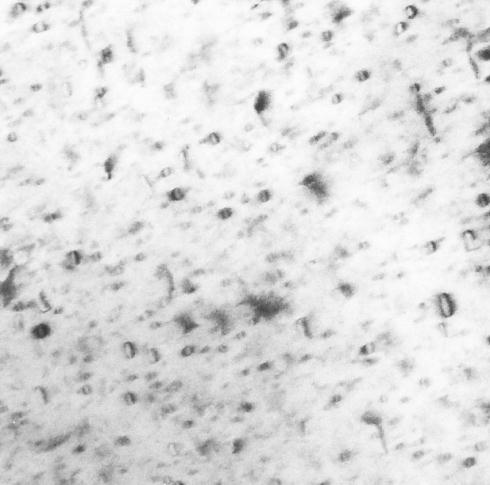
 (3)

ν – коэффициент Пуассона, φ – угол между полным вектором Бюргерса и направлением полоски, b – вектор Бюргерса, γ – ЭДУ, μ – модуль сдвига.

Данный результат наших исследований также хорошо согласуется с результатами других работ[1-2].

Анализируя полученные данные можно отметить, что значение ЭДУ в германии практически в два раза выше, чем в кремнии, а плотность дефектов существенно ниже. Наряду с этим в германии обнаружено, что разнообразие структурных дефектов и их размеры много меньше, чем в кремнии, скорость эволюция дефектов также крайне низка. Все это позволяет сделать заключение, что в данных полупроводниках значение ЭДУ определяет дефектостойкость материала. В случае кремния и германия это подтверждается результатами наших исследований.

Далее проводился теоретический расчет «критических» радиусов дислокационных петель, образующихся в исследуемых полупроводниках группы A2B6. Полученные результаты сравнивались с экспериментальными данными ПЭМ-исследований.



100 нм

a b

Рис.6. Образование дислокационных петель в CdTe в результате ионного травления тонкой фольги ионами Ar+ с энергией 5 кэВ в течение 15 мин: а - зависимость плотности (*ρ*) дислокационных петель от размеров (*r*); б – ПЭМ - изображение.

Критический радиус дислокационной петли является важной характеристикой, которая показывает те точки, после которых происходит качественные и количественные изменения дефектной сети материала. Поскольку в материале, как правило, присутствует большое количество дислокационных петель, размеры которых весьма различны, но при достижении определенного значения радиуса, который носит название «критический» дислокационной петли (rcrit), происходят резкие изменения в плотности дислокации петель радиусов больше, чем rcrit, при этом происходит переход петель, образованных частичными дислокациями типа Шокли или Франка, в дислокационные петли, образованные полными дислокациями с вектором Бюргерса типа b = a/2<110>.

Согласно классической модели описания энергий процесса образования дислокационных петель, общая энергия образования дислокационной петли (*El, perfect*) включает в себя энергию дефекта упаковки дислокационной петли (*ESF*) и упругую энергию дислокационной линии (*El, Frank*) [2].

*El, perfect = ESF + El, Frank* (4)

Из анализа уравнения (4) получена связь между критическим радиусом (rcrit) и энергией дефекта упаковки ( γ) как:

 (5)

Подставляя экспериментальные значения ЭДУ, вычислен «критический» радиус дислокационных петель в кремнии, германии и арсениде галлия (Табл. 1).

**Таблица 1**. Значения rcrit для ряда полупроводников по классической модели

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **Материал** | **ЭДУ, мДж/м2** | **«Критический» радиус, нм** |
| Кремний (Si) | 50 - 60 | 46.5 – 58.1 |
| Германий (Ge) | 90 | ~25.1 |
| Арсенид галлия(GaAs) | 55±5 | 40.1 – 50.2 |

Более энергетически выгодным является процесс образования петель, учитывающий скольжение двух частичных дислокаций Шокли в разных плоскостях. В этом случае формула (4) приобретает вид:

*El, perfect = ESF + El, Frank**+ 2EShockley* (6)

где

 [3], (7)

где *β* – угол между вектором Бюргерса и дислокационной линией сегмента Шокли, равный π/6.

С учетом уравнений (6) и (7) выражение для *γ* можно записать как:

 (8)

Зная значения ЭДУ для полупроводниковых материалов, из уравнения (8) рассчитаны критические радиусы дислокационных петель для различных полупроводников.

Для решения полученного трансцендентного уравнения использовали программный пакет «Maple».

Значения *rcrit*для ряда полупроводников представлены в табл.2.

Приведенные в табл.2 значения *rcrit* сравнивались с экспериментальными данными, полученными в результате электронно-микроскопических исследований полупроводниковых материалов. Установлено, что рассчитанныепо классической модели *rcrit* не соответствуют экспериментальным значениям и завышены на порядок величины. Значения *rcrit* , рассчитанные по формуле (8) находятся в хорошем соответствии с экспериментальными значениями (последний столбец табл.2).

**Таблица 2**. Значения *rcrit* для ряда полупроводников

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Материал | Параметр решетки,  nm | Коэфф. Пуасона | Модуль  сдвига, GPa | ЭДУ, mJ/m2 | *rcrit* , nm | |
| Класс. модель | Класс. модель с уч. дисл. Шокли |
| Ge | 0.566 | 0.26 | 31.7 | 90 | ~25.1 | ~ 3.8 |
| Si | 0.543 | 0.27 | 42.9 | 50-60 | 46.5 - 58.1 | 7.9 – 10.1 |
| GaAs | 0.565 | 0.31 | 32.9 | 55±5 | 40.1 - 50.2 | 7.8 – 9.9 |
| ZnTe | 0.609 | 0.36 | 17.3 | 16±4 | 92.9 - 171 | 22.5-42.5 |
| CdTe | 0.648 | 0.41 | 9.2 | 11±1.9 | 95.5- 145 | 26.3 - 41 |
| ZnSe | 0.566 | 0.28 | 27.5 | 11.4±1.3 | 197 - 257 | 38.4 - 51 |
| CdS | 0.527 | 0.4 | 16.1 | 7.8±1.9 | 162 - 290 | 44.9 – 80.2 |
| ZnS | 0.541 | 0.38 | 21.7 | 5-6 | 405 - 500 | 110 – 136 |
| 0.28 | 26.3 | 82 – 101 |

Из табл.2 также видно, что критический радиус дислокационных петель в полупроводниках напрямую связан с энергией дефекта упаковки материала и уменьшается с ростом ЭДУ. То есть, чем выше ЭДУ в материале, тем меньше значение «критического» радиуса и тем более низкая вероятность обнаружить крупные дислокационные петли. Это хорошо согласуется с электронно-микроскопическими исследованиями [4]. В частности, из экспериментов с использованием просвечивающего электронного микроскопа следует, что сульфид цинка, имеющий самую низкую ЭДУ среди исследованных полупроводников, имеет самую высокую плотность и разнообразие структурных дефектов, а размеры дислокационных петель могут достигать значений на несколько порядков превышающие аналогичные размеры в других анализируемых материалах.

Таким образом, показано, что имеется корреляция между критическим радиусом дислокационной петли и значением ЭДУ. Критический радиус дислокационных петель уменьшается с ростом ЭДУ. Поскольку ЭДУ универсальная величина, указывающая на стойкость материала к дефектообразованию, то значение «критического» радиуса дислокационной петли можно рассматривать как меру дефектостойкости полупроводников. Чем больше критический радиус дислокационных петель, тем менее стоек полупроводник к дефектообразованию и в нем происходит больше структурных нарушений при идентичных режимах воздействия (обработки). При этом размеры и плотность структурных дефектов в материалах при аналогичных условиях обработки зависят от величины энергии дефекта упаковки.

**В заключении** приведены основные результаты и выводы диссертационной работы.

**Основные результаты и выводы**

* + - 1. Методами просвечивающей электронной микроскопии установлены закономерности образования вторичных структурных дефектов в кремнии, германии, арсениде галлия, сульфиде цинка, селениде цинка, теллуриде цинка, сульфиде кадмия, теллуриде кадмия при отжиге. Показано, что в последовательности ZnS → ZnSe ≈ CdS → CdTe → ZnTe Si GaAs образуются дефекты с меньшими размерами и меньшей плотностью. Получены данные по видам, плотности и эволюции структурных дефектов в данных кристаллах.
      2. Отжиг кристаллов А2В6 в атмосфере, насыщенной атомами катиона, сопровождается образованием колоний примесных преципитатов, что во многом аналогично формированию примесных преципитатов в Si при термообработках, и связывается с миграцией примесей и точечных дефектов на «стоки» (например, дислокации). Средние размеры преципитатов уменьшаются с ростом величины энергии дефекта упаковки, что наблюдается при переходе от ZnS→ZnSe→CdTe→к Si.
      3. Используя значения энергии дефекта упаковки в исследуемых материалах произведен теоретический расчет «критических» радиусов дислокационных петель с увеличением которого происходит переход частичных дислокационных петель в полные дислокационные петли. Полученные результаты сопоставлены с экспериментальными данными и показали хорошую согласованность.
      4. Используя классическую модель экспериментально вычислена энергия дефекта упаковки в кремнии и германии, составившая 5,5∙10-2 и 9∙10-2 Дж/м2, что значительно выше значений энергии дефекта упаковки в классе исследованных полупроводников А2В6 и свидетельствует о высокой «дефектостойкости» Si и Ge по сравнению с ZnS, ZnSe, ZnTe, CdS и CdTe.
      5. Анализ полученных результатов исследования подтвердил прямую зависимость стойкости изучаемых материала к дефектообразованию от значения энергии дефекта упаковки. На полупроводниковых материалах показано, что с ростом ЭДУ увеличивается стойкость к образованию дефектов, уменьшается плотность и размеры дефектов. При уменьшении ЭДУ происходит более интенсивная эволюция вторичных дефектов, появляются новые типы дефектов, увеличивается плотность дефектов и их размеры. Данные результаты хорошо согласуются с аналогичными результатами работ в металлах и сплавах.
      6. Разработано физическое обоснование диагностики микродефектов в кремниевых солнечных элементах с помощью микроплазм. Установлено, что анализ интенсивности и количества микроплазм, возникающих на лицевой поверхности солнечных элементов при увеличении приложенного к p-n-переходу обратного напряжения, может являться экспресс методом обнаружения микродефектов и оценки качества солнечных батарей. Оценены кинетические параметры и условия излучательной рекомбинации носителей тока в микроплазмах.

**Список публикаций по теме диссертации:**

1. **Мозжерин, А.В.** Оценка критического радиуса дислокационных петель в кремнии и германии с учетом энергии дефекта упаковки/ А. В. Мозжерин // Фундаментальные исследования. – 2012. – № 11 (часть 3). – стр. 700-704;
2. **Мозжерин, А.В.** Изучение энергии дефекта упаковки в кремнии методом электронной микроскопии / А. В. Мозжерин // Естественные и технические науки. – 2011. – №3. – С. 50–53.
3. Логинов, Ю.Ю. Оценка степени дефектообразования в полупроводниках по критическому радиусу дислокационных петель /Ю.Ю. Логинов, **А.В. Мозжерин**, А.В. Брильков // Фундаментальные исследования. – 2013. – № 8 (часть 5). – стр. 1071-1074;
4. Логинов, Ю.Ю. Влияние упругих напряжений на формирование структурных дефектов в полупроводниках/ Ю.Ю. Логинов, **А.В. Мозжерин**, А.В. Брильков.// Вестн. Сиб. гос. аэрокосмич. ун-та им. акад. М.Ф.Решетнева. 2013, вып. 2 (48). - С.198-200.
5. Ленченко, В.М. Лавинное умножение и излучательная рекомбинация носителей тока в кремниевых солнечных элементах / В.М. Ленченко, Ю.Ю. Логинов, **А.В. Мозжерин** // Вестн. Сиб. гос. аэрокосмич. ун-та им. акад. М.Ф.Решетнева. 2010, вып. 4(30). - С.11-15.
6. Ленченко, В.М. Оценка эффективности фотопреобразования в кремниевых солнечных элементах с учетом рекомбинационных и тепловых потерь энергии / В.М. Ленченко, Ю.Ю. Логинов, **А.В. Мозжерин** // Успехи современного естествознания. - 2011, № 9. - С. 89-93.
7. Ленченко, В.М., Анализ тепловых и рекомбинационных потерь фототока в солнечных элементах космических аппаратов / В.М. Ленченко, Ю.Ю. Логинов, **А.В. Мозжерин** // Вестн. Сиб. гос. аэрокосмич. ун-та им. акад. М.Ф.Решетнева. 2011, вып. 3(36). - С.43-48.
8. Логинов, Ю.Ю. Влияние режимов роста монокристаллов на перенос и накопление примесных атомов в растущем кристалле / Ю.Ю. Логинов, В.М. Ленченко, **А.В. Мозжерин** // Вестн. Сиб. гос. аэрокосмич. ун-та им. акад. М.Ф.Решетнева. 2009, вып. 4(25). - С.120-124.
9. **Мозжерин, А.В. Современные методы оценки энергии дефекта упаковки в полупроводниковых материалах / А.В. Мозжерин // Молодёжь и наука: сборник материалов VII Всероссийской научно–технической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, посвященной 50–летию первого полета человека в космос [Электронный ресурс] /отв. ред. О.А.Краев – Красноярск : Сиб. федер. ун–т., 2011**
10. **Мозжерин, А.В.** Электронно–микроскопические исследования процессов дефектообразования в основных полупроводниковых материалах/ А. В. Мозжерин, Ю. Ю. Логинов // Юбилейная X Всерос. Школа–семинар по пробл. физики конденсир. состоян в–ва, Екатеринбург, 9–15 ноября 2009 г.: ИФМ УрО РАН, 2009. – С.249–250.
11. **Мозжерин, А.В.**, Исследование процессов дефектообразования в кристаллах кремния и германия методом просвечивающей электронной микроскопии/ А. В. Мозжерин, Ю. Ю. Логинов // Матер. ХIV Межд. научн. конф. Решетневские чтения, Красноярск: СибГАУ, 2010. – Ч.2. – С.589–590.
12. Логинов, Ю.Ю. Электронно–микроскопические исследования гетероэпитаксиальных наноструктур солнечных элементов / Ю.Ю. Логинов, **А.В. Мозжерин** // Матер. ХIII Межд. научн. конф. Решетневские чтения, Красноярск: СибГАУ, 2009. – Ч.2. – С.682–683.
13. Логинов, Ю.Ю. Закономерности дефектообразования в облученных полупроводниках / Логинов Ю.Ю., **Мозжерин А.В.** // Матер. ХV Межд. научн. конф. Решетневские чтения, Красноярск: СибГАУ, 2011. – Ч.1. – С.398–399.
14. **Мозжерин, А.В.** Электронно-микроскопические исследования структурных дефектов в кремнии и германии / А.В. Мозжерин // Материалы пятнадцатой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых учёных ВНКСФ-15: Кемерово-Томск. 2009, С. 209 – 210.
15. **Мозжерин, А.В.** Особенности дефектообразования в полупроводниковых кристаллах кремния и германия / А.В. Мозжерин // Материалы XLVII Международной научной студенческой конференции «Студент и научно-технический прогресс»: Физика / Новосибирский государственный университет. 2009, С.156.
16. **Мозжерин, А.В.** Исследование процессов дефектообразования в кристаллах кремния и германия методом просвечивающей электронной микроскопии / А.В. Мозжерин, Ю.Ю. Логинов // Матер. ХIV Межд. научн. конф. Решетневские чтения, Красноярск: СибГАУ, 2010. - Ч.2. - С.589-590.
17. **Мозжерин, А.В.** Исследование структурных дефектов сульфида цинка, легированного галлием или индием / А.В. Мозжерин, Ю.Ю. Логинов // Материалы семнадцатой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых учёных ВНКСФ-17: Екатеринбург. 2011, С. 194.
18. **Мозжерин, А.В. Исследование энергии дефекта упаковки в германии методом электронной микроскопии / А.В. Мозжерин //** Молодежь и наука: сборник материалов VIII Всероссийской научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, посвященной 155-летию со дня рождения К.Э.Циолковского [Электронный ресурс] № заказа 7880/отв. ред. О.А.Краев - Красноярск : Сиб. федер. ун-т., 2012

**Список цитируемой литературы:**

1. Art, A. Stacking Fault Energy in Germanium / A. Art, E. Aerts, P. Delavignette, S. Amelinckx // AppliedPhysics Letters. – 1963. – Vol. 2, No. 2. – P. 40–41.
2. Glas, Frank. A simple calculation of energy changes upon stacking fault formation or local crystalline phase transition in semiconductors / Frank Glas // Journal of Applied Physics. – 2008. – Vol. 104, 093520. – P. 1–6.
3. Herrera, M. Unfaulting of dislocation loops in the GaInNAs alloy: An estimation of the stacking fault energy / M. Herrera, D. González, J. G. Lozano, R. García, M. Hopkinson, H. Y. Liu, M. Gutierrez, P. Navaretti // Applied Physics Letters. – 2005. – Vol. 98, 023521. – P. 1–7.
4. Логинов, Ю.Ю. Закономерности образования структурных дефектов в полупроводниках А2В6: науч. изд. / Ю. Ю. Логинов, Браун Пол Д., Дьюроуз Кен. – М.: Логос, 2003. – 304 с.