

Ф И З И К А

УДК 548.52

К ВОПРОСУ О ФОРМООБРАЗОВАНИИ ПРОФИЛИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЯ ПРИ ИХ ВЫРАЩИВАНИИ ПО СПОСОБУ СТЕПАНОВА

Онищук С. А., Тумаев Е. Н.

TO THE QUESTION OF THE FORMATION OF PROFILED SILICON CRYSTALS
AT ITS GROWTH BY STEPANOV'S METHOD

Onishchuk S. A., Tumaev E. N.

Kuban State University, Krasnodar, 350040, Russia
e-mail: tumayev@phys.kubsu.ru

Abstract. In this article the processes of formation of single crystals during its growing by Stepanov's method are studied. This growing method consists of drawing crystals through the crystal former (shaper). The presence of a form-building agent (i.e. non-free growth of crystals) leads to increase in concentration of defects in the crystal structure, which decreases the quality of solar cells. In this regard, the article explores the question: what forms of growth arise during the growing of silicon single crystals by Stepanov's method. Typical defects that arise when growing single crystals of silicon in the form of ribbons and pipes are considered. Experimental investigations of defects in profiled crystals have shown that the defects are characterized by the formation of twinning structures, i.e. two neighboring single crystals separated by an atomic plane. The influence of the seed orientation on twinning formation process is studied. In particular, the peculiar angles between the growth directions and the twins formation are found. The formation of mosaic structure which competes with the twin structure and is displaced by the latter is observed. The appearance of spiral structures during the growth of single crystals of tubular forms is also observed.

To explain the features of formation we calculated (per one atom) the interaction energies of neighboring parallel atomic layers. The Lennard-Jones potential was chosen as the interaction potential. The results of the calculation showed that among the planes with small values of Miller's indices the plane (112) possesses the smallest interaction energy. The family of planes equivalent to the (112) plane has a close orientation, and the angles between its directions are in good agreement with the angles in which direction the twins are formed. The presence of three close directions of twinning also explains the formation of spiraling structures when growing silicon single crystals with tubular cross section.

Keywords: solar cells, profiled silicon, Stepanov's method, twinning, crystallographic planes, Miller indices.

В последнее время при создании солнечных элементов (СЭ) как устройств экологически чистой «зеленой» энергетики наблюдается определенный интерес к созданию СЭ на основе монокристаллов кремния [1,2]. Преимущества кремния по сравнению с полупроводниками типа A_2B_6 (GaAs и др.) заключаются в их низкой стоимости и сравнительно несложной технологии получения монокристаллов.

К сожалению, одним из главных недостатков солнечных элементов на базе кремния, является их низкая эффективность. Наряду

с низким КПД низкая эффективность связана с потерями энергии падающего света, в том числе с неполным его использованием.

Одним из способов повышения эффективности за счет снижения потерь падающего света является использование профилированных монокристаллов. Основным способом получения таких монокристаллов является метод Степанова [3]. Однако высокая плотность рекомбинационно активных дефектов в таком материале приводит к снижению эффективности СЭ относительно элементов на основе монокристаллического кремния, полученно-

Онищук Сергей Алексеевич, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры общей физики и информационных систем Кубанского государственного университета; e-mail: onishchuk52@mail.ru.

Тумаев Евгений Николаевич, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры теоретической физики и компьютерных технологий Кубанского государственного университета; e-mail: tumayev@phys.kubsu.ru.

го методом Чохральского [4]. Поэтому актуальной задачей является выявление наиболее существенных факторов, определяющих свойства подложек и влияющих на характеристики СЭ. Эти факторы следует искать прежде всего в особенностях структуры профилированного кремния, связанных с особенностями технологического процесса получения этого материала.

Профилированный кремний в производстве СЭ выращивается по способу Степанова, который отличается от метода Чохральского наличием формообразующего элемента (формообразователя) на поверхности расплава. В зарубежной литературе различные схемы его применения известны под названиями EFG и CAST [5–7].

При исследовании устойчивости процесса кристаллизации в методе Степанова было обнаружено [8], что формообразователь не только ограничивает область образования кристалла, но во многих случаях делает процесс кристаллизации устойчивым. Результаты теоретических и экспериментальных исследований устойчивого роста кристаллов обобщены в монографии [9].

Однако в литературе практически отсутствуют сведения об особенностях структуры монокристаллических зерен. Отсутствуют сведения об образовании двойниковых границ в области кристалла, прилегающей к границе затравления. Отсутствуют работы по изучению влияния пластической деформации кристаллов профилированного кремния на эффективность преобразования солнечной энергии. Не установлена связь между составом шихты и эффективностью СЭ на основе выращенного материала.

В настоящее время наиболее распространено профилирование кремния для СЭ в виде лент и полых многогранных труб. Выращивание труб является более устойчивым процессом, так как в нем отсутствует низкая устойчивость кристаллизации на краях мениска. Применение профилирования кремния исключает резку слитков, шлифовку, полировку и снижает потери кремния, которые при использовании материала, выращенного методом Чохральского, достигают 50–70 %. Однако вследствие более высокой скорости кристаллизации и применении графитового формообразователя, погруженного в расплав, в профилированном кремнии возникают сле-

дующие структурные дефекты, перечисленные по мере убывания их активности [10]:

1. Включения карбида кремния SiC.

2. Границы моноблоков.

3. Малоугловые границы.

4. Монокристаллические участки с пониженным временем жизни неосновных носителей заряда.

5. Некогерентные двойниковые границы.

6. Дислокации.

7. Когерентные двойниковые границы.

В областях включения SiC время жизни основных носителей менее 10^{-8} с, в то время как в моноблоках эта величина порядка 10^{-6} с. Количество границ блоков и малоугловых границ велико в начальной стадии роста, а на развитой части их не более 2 % от общего числа границ, поэтому основными типами дефектов являются двойниковые границы. Они распределены неравномерно, сгруппированы в области шириной 3–5 мкм, расстояние между ними составляет 10–500 мкм. Существуют дефектные области, состоящие из системы микродвойников шириной порядка 4 нм. Двойниковые границы являются центрами повышенной рекомбинации, хотя их электрическая активность, исследованная методом EBIC, различна. К таким дефектным областям относятся:

1. Электрически неактивные границы (видимо, когерентные).

2. Границы с прерывистой активностью.

3. Границы со средней активностью.

4. Границы с высокой активностью (видимо, некогерентные).

Обнаружены побочные двойниковые границы второго порядка типа $\{115\}$, $\{111\}$. Здесь и далее приняты следующие кристаллографические обозначения: $[hkl]$ обозначает кристаллическую полкость с индексами Миллера h , k , l . Семейство эквивалентных плоскостей обозначается как $\{hkl\}$. Кристаллографические направления обозначаются через (hkl) , а семейства эквивалентных направлений — $\langle hkl \rangle$. Они могут иметь оборванные связи, образующие глубокие электронные состояния в запрещенной зоне кремния подобно оборванным связям дислокаций.

При выращивании кремниевых лент через графитовый формообразователь, покрытый слоем карбида бора толщиной 50 мкм, были получены протяженные монокристаллические области без включений SiC и с пониженной плотностью дислокаций (10^2 –

10^4 см^{-2}) [11]. При этом основными видами дефектов в монокристаллических лентах были дислокации и слоистое распределение примеси.

Съемка по Лауэ показала, что кремниевые ленты имеют закономерную повторяющуюся структуру, обусловленную применением высоких скоростей роста и формообразователя из графита [12]. Обнаружено наличие границ $\{111\}$, перпендикулярных поверхности ленты и параллельных направлению вытягивания. Показано, что плоскость ленты ориентирована $\{110\}$, а направление вытягивания совпадает с кристаллографическим направлением $\langle 112 \rangle$.

В работе [13] при использовании EBIC установлено, что электрическая активность межблочных границ в кремниевых лентах намного превосходит активность прочих структурных дефектов. Причем она резко повышается при увеличении содержания примеси в объеме образца. Основным источником загрязнения считается графитовый формообразователь. Влияние двойников определяется примесным состоянием материала. Поляризационно-оптическим методом были определены остаточные напряжения. Типичная величина напряжений 5–7 МПа.

При исследовании электрической активности границ было установлено [14], что на сколе электрически активных когерентных границ содержатся примесные выделения, концентрация которых достигает 10^3 – 10^4 см^{-2} , а также дислокации. На сколе электрически неактивной границы типа $\{111\}$ – $\{111\}$ количество примесных выделений было много меньше. При исследовании процесса плавления профилированного кремния было обнаружено уменьшение температуры плавления на некоторых границах на величину порядка 10°C .

В работе [15] показано, что профилированные кристаллы кремния имеют геометрические неоднородности, характеризующиеся периодичностью колебаний толщины. Макроструктуру материала можно разбить по морфологическим признакам на три основные группы: поликристаллические двойники — 58 % в общей структуре профиля; крупные монокристаллические зерна с прямолинейными границами — 19 %; мозаичная структура с криволинейными границами — 23 %. Обнаружено наличие значительных остаточ-

ных упругих напряжений, величина которых может достигать 1–5 МПа.

Таким образом, профилированный кремний отличается от монокристаллического высоким содержанием структурных дефектов, более высокой концентрацией примесей, наличием внутренних упругих напряжений, разбросом физических свойств и геометрически неоднородностями.

Профилированный кремний относительно монокристаллического, выращенного методом Чохральского, имеет более высокую концентрацию рекомбинационных центров. Это особенно сказывается на характере рекомбинационно-генерационных процессов в обедненном слое СЭ. Поэтому представляет интерес рассмотреть такие процессы и установить их влияние на характеристики приборов.

Существует несколько моделей, рассматривающих рекомбинационно-генерационные процессы. Общепринятой является модель Саха–Нойса–Шокли, в которой предполагается существование одного энергетического уровня равномерно распределенных генерационно-рекомбинационных центров. Положение этого уровня близко к положению уровня Ферми полупроводника с собственной проводимостью.

Приближенный анализ рекомбинационно-генерационного процесса переноса носителей заряда в обедненном слое основан на предположении о том, что в этом слое положение квазиуровней Ферми не меняется. Шокли и Рид получили выражение, из которого видно, что максимальное значение скорости рекомбинации носителей [16] соответствует такому положению уровня химического потенциала для собственного полупроводника, при котором он приблизительно одинаково удален от квазиуровней Ферми для электронов и дырок. В противном случае скорость рекомбинации резко снижается, и поэтому при прямом смещении интенсивная рекомбинация носителей заряда происходит в пределах ограниченной области обедненного слоя.

На настоящее время в литературе имеются сведения о дефектах структуры профилированного кремния и их электрической активности. Анализ имеющихся данных показывает широкие возможности профилированного кремния как материала для производства СЭ наземного применения в силовых энергетических установках. Однако эффективность

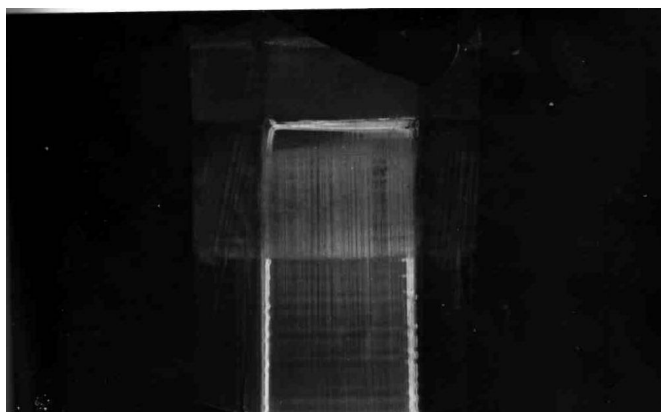


Рис. 1. Двойниковые границы параллельно оси роста

таких приборов ниже, чем у СЭ на монокристаллическом кремнии.

Целью данной работы было исследование устойчивости структуры профилированного кремния при росте кристалла.

Образования двойниковых границ на начальной стадии роста кристалла имеет свои особенности. Исследование развития структуры протяженных профилированных кристаллов кремния показало, что существует область в начальной стадии роста, характеризующаяся наличием многочисленных границ, направления которых часто составляют с осью роста углы величиной более 30° . Протяженность такой области достигает 500 мкм, после чего структура становится однородной, характеризуемой зернами и двойниковыми областями длиной в несколько см, границы которых имеют небольшие углы с осью профилированного кристалла.

Было установлено, что при использовании в качестве затравки пластин монокристаллического кремния с поверхностью $\{111\}$ область кристалла вблизи границы затравления имеет специфическую структуру, связанную с ориентацией затравочных пластин. Направление двойниковых границ с точностью до 1° совпадает с направлением $\langle 110 \rangle$ монокристаллической затравки. Причем образование протяженных областей с двойниковыми границами происходит, если это направление отклонено на угол не более 22° от оси роста кристалла (рис. 1). При ориентации затравки $\{111\}\langle 112 \rangle$ в направлении вытягивания с точностью до 8° образовывалась мозаичная структура, причем часть межзеренных границ с точностью до одного градуса совпадала с направлением $\langle 110 \rangle$ монокристаллической

затравки, такие границы пересекались между собой под углом приблизительно 60° (рис. 2). В процессе роста эта структура становилась крупнозеренной.

Переориентация кристалла с образованием границ двойникования обусловлена условиями, возникающими на фронте кристаллизации. Рассмотрим этот процесс, выбрав затравочные монокристаллические пластины с поверхностью, имеющей кристаллографическую ориентацию (111) и фиксированное направление $[112]$. Ориентируем затравку так, чтобы направление $[112]$ совпадало с осевым градиентом температуры, а направление $[110]$ принадлежало фронту кристаллизации. В этом случае основание пирамиды роста, имеющей внешнюю грань (111) , отклоняется от изотермической поверхности фронта кристаллизации на угол $19^\circ 47'$. Поэтому кристаллографическая плоскость (111) не формируется на фронте кристаллизации, а внешняя поверхность не сохраняет ориентацию (111) .

Кристаллографические плоскости (111) и $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ затравок являются источниками для образования границ двойников. При выбранной ориентации затравок эти плоскости эквивалентны и растут в пересекающихся направлениях $[112]$ и $[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$ соответственно. В результате вместо четко выраженной двойниковой структуры образуется переходная область с пересекающимися границами мелких зерен. Если затравка ориентирована так, что направление $[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$ образует некоторый угол с осевым градиентом температуры на фронте кристаллизации, то двойникование по одной из плоскостей (111) или $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ оказывается предпочтительней. Избранной оказывается плоскость, имеющая меньшее отклонение со-

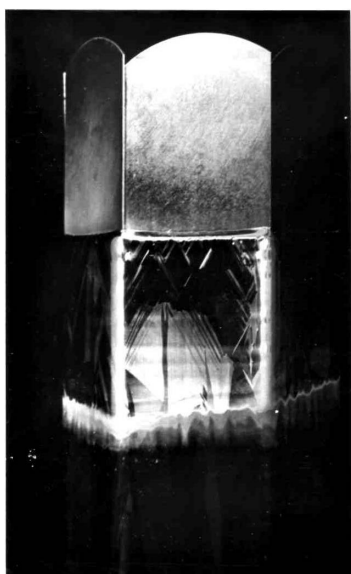


Рис. 2. Образование границ
вблизи области затравления
при ориентации затравки
 $\{111\}\langle 112\rangle$



Рис. 3. Образование мозаики



Рис. 4. Винтовая труба

ответствующего направления $[0\bar{1}1]$ или $[\bar{1}01]$ от градиента температуры.

В результате двойникового внешняя поверхность растущего кристалла приобретает кристаллографическую ориентацию, сохраняющуюся при рассматриваемой операции двойникового. Кристаллографическая плоскость $\{110\}$ удовлетворяет этому требованию, поэтому поверхность растущего кристалла сохраняет свою ориентацию. Сформировавшаяся структура оказывается повернутой относительно кристаллической решетки затравочного монокристалла в плоскости границы затравления. Из полученных результатов следует, что ориентация затравок $\{111\}\langle 110\rangle$ в направлении вытягивания позволяет получить наиболее протяженную двойниковую область по всей ширине грани. Экспериментальная проверка подтвердила это предположение.

Были получены кристаллы с гранями, имеющими двойниковые границы по всей ширине (рис. 1), с протяженностью более 500 мм. В некоторых случаях вследствие локального нарушения структуры из-за флуктуации температуры на фронте кристаллизации либо внедрения микрокристалла карбида кремния происходила локальная переориентация структуры, что приводило к образованию мелкозеренной мозаики с границами под значительными углами к оси роста кристалла

(рис. 3). При дальнейшем выращивании мозаичная структура разрасталась, вытесняя двойниковую и заполняя всю площадь грани [17, 18].

Для определения влияния двойниковой структуры подложек на эффективность преобразования энергии были исследованы СЭ на подложках из одного кристалла с различными типами структуры. Среднее КПД у СЭ на подложках с двойниковой структурой составляло 9,1 %, такая же эффективность была у приборов на подложках с крупнозеренной структурой. У СЭ на подложках с мозаичной структурой среднее КПД было несколько ниже и составляло 8,6 %. При этом суммарное число приборов на подложках с крупнозеренной и мозаичной структурой приблизительно соответствовало числу СЭ на подложках с двойниковой структурой.

Полученные данные позволяют количественно оценить влияние структуры с различным типом межзеренных границ на эффективность преобразования солнечной энергии. При этом следует учесть, что в областях с двойниковыми границами средняя плотность дислокаций значительно ниже, чем в областях с крупноблочной или межзеренной структурой. Таким образом, в результате проведенных исследований установлено, что протяженные области с двойниковой структурой на гранях профилированных кристаллов

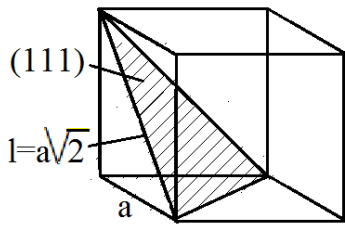


Рис. 5. Кристаллическая плоскость (111) в кубической ячейке

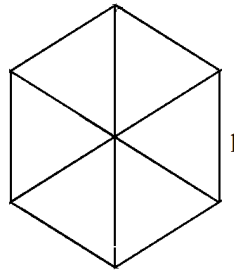


Рис. 6. Расположение ближайших к выделенному узлу соседей для плоскости (111)

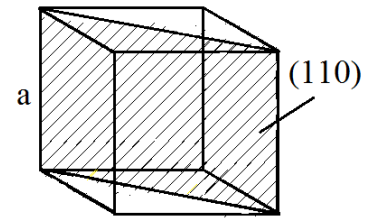


Рис. 7. Кристаллическая плоскость (110) в кубической ячейке

кремния могут быть получены с помощью специальной ориентации монокристаллических затравок.

Эффективность СЭ на подложках с двойниковой структурой выше, чем на подложках с мозаичной структурой, что указывает на влияние рекомбинационной активности межзеренных на потери энергии в приборах. Однако количественная оценка этого влияния показывает, что рекомбинация носителей на межзеренных границах не является определяющей в снижении эффективности СЭ на основе профилированного кремния по сравнению с СЭ на основе монокристаллического кремния, так как КПД у последних выше приблизительно в 1,5 раза.

Границы зерен достаточно устойчивы. Так, при вращении трубы образовывалась винтовая поверхность (рис. 4), которую можно рассматривать в каждой точке как радиальные колебания поверхности. Отмечено, что границы при этом сохраняют направление, не меняя рисунка структуры.

Выясним особенности роста монокристалла кремния по разным направлениям. При расчете взаимодействия атомных слоев используем потенциал Леннарда – Джонса

$$U(r) = \frac{U_0}{4} \left(\frac{a^{12}}{r^{12}} - \frac{2a^6}{r^6} \right),$$

где $a = 0,543$ нм — постоянная кристаллической решетки Si и параметр U_0 связан с минимальным значением потенциальной энергии взаимодействия соседних атомов кремния U_{\min} равенством

$$U_{\min} = -\frac{U_0}{4}.$$

Значение параметра U_0 может быть оценено, исходя из температуры плавления T_{melt} .

Температуре плавления соответствует кинетическая энергия движения атомов, равная

$$\varepsilon = \frac{3}{2} k T_{melt}.$$

Абсолютное значение U_{\min} приблизительно равно энергии ε .

Рассмотрим семейство кристаллографических граней {111}. Кристаллическая решетка монокристалла кремния относится к кубической сингонии, элементарная ячейка представляет собой куб с ребром a , кристаллографические оси совпадают по направлениям с осями декартовой системы координат.

На грани (111) соседние узлы кристаллической решетки располагаются в вершинах равносторонних треугольников. Один из таких треугольников отмечен на рис. 5 штриховкой. Стороны этих треугольников равны $l = a\sqrt{2}$, и, соответственно, площади этих треугольников на грани (111) равны

$$S_{111} = \frac{l^2\sqrt{3}}{4} = \frac{\sqrt{3}a^2}{2}.$$

Тогда относительная плотность заполнения грани (111) равна

$$\rho_{111} = \frac{2}{\sqrt{3}} = 1,155.$$

Подсчитаем энергию взаимодействия двух соседних граней (111), отнесенную к одному узлу решетки. При расчете учтем взаимодействие только ближайших соседей (рис. 6). Поскольку длина пространственной диагонали куба равна $\sqrt{3}a$, то расстояние между соседними плоскостями (111) равно $d = a\sqrt{3}/2$. Следовательно, расстояние между ближайшими узлами соседних плоскостей $r_1 = d$, а расстояние между узлами, относящимися ко второй координационной сфере

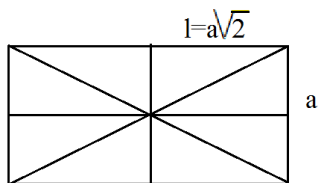


Рис. 8. Расположение ближайших к выделенному узлу соседей для плоскости (110)

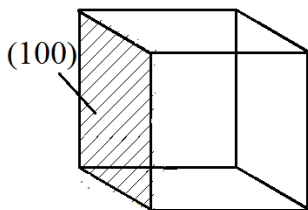


Рис. 9. Кристаллическая плоскость (100) в кубической ячейке

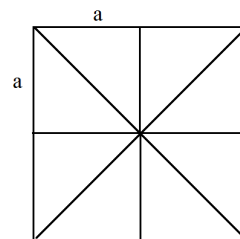


Рис. 10. Расположение ближайших к выделенному узлу соседей для плоскости (100)

$r_2 = \sqrt{d^2 + l^2} = a\sqrt{11}/2$. Энергия взаимодействия слоев (111) равна

$$E_{111} = U(r_1) + 6U(r_2).$$

Производя вычисления, получаем

$$E_{111} = \frac{U_0}{4} \left[\frac{a^{12}}{(3a^2/4)^6} - \frac{2a^6}{(3a^2/4)^3} \right] + 6 \frac{U_0}{4} \left[\frac{a^{12}}{(11a^2/4)^6} - \frac{2a^6}{(11a^2/4)^3} \right],$$

откуда

$$E_{111} = 0,0787U_0.$$

Рассмотрим далее семейство плоскостей $\{110\}$. На плоскости (110) узлы располагаются в вершинах прямоугольника со сторонами $l = \sqrt{2}a$ и a (рис. 7). Площадь этого прямоугольника равна

$$S_{110} = a^2\sqrt{2}.$$

Относительная плотность заполнения грани (110) равна

$$\rho_{110} = 1/\sqrt{2} = 0,707.$$

Расстояние между плоскостями (110) равно половине диагонали грани кубической ячейки

$$d = a\sqrt{2}/2.$$

По аналогии с предыдущим расчетом подсчитаем энергию взаимодействия граней (110), отнесенную к одному узлу решетки. В данном случае у узла есть ближайший узел соседней плоскости, два узла во второй координационной сфере, два узла в третьей координационной сфере и четыре узла в четвертой координационной сфере (рис. 8). Находим соответствующие расстояния

$$r_1 = d = a\sqrt{2}/2, \quad r_2 = \sqrt{d^2 + a^2} = a\sqrt{3}/2,$$

$$r_3 = \sqrt{d^2 + l^2} = a\sqrt{5}/2,$$

$$r_4 = \sqrt{d^2 + a^2 + l^2} = a\sqrt{7}/2.$$

Энергия взаимодействия слоев (110) равна

$$E_{110} = U(r_1) + 2U(r_2) + 2U(r_3) + 4U(r_4).$$

Производя вычисления, получаем

$$E_{110} = \frac{U_0}{4} \left[\frac{a^{12}}{(a^2/2)^6} - \frac{2a^6}{(a^2/2)^3} \right] + 2 \frac{U_0}{4} \left[\frac{a^{12}}{(3a^2/4)^6} - \frac{2a^6}{(3a^2/4)^3} \right] + 2 \frac{U_0}{4} \left[\frac{a^{12}}{(5a^2/4)^6} - \frac{2a^6}{(5a^2/4)^3} \right] + 4 \frac{U_0}{4} \left[\frac{a^{12}}{(7a^2/4)^6} - \frac{2a^6}{(7a^2/4)^3} \right],$$

откуда

$$E_{110} = 11,720U_0,$$

что значительно превышает значение энергии E_{111} . Причину такого расхождения легко понять, если при подсчете энергии взаимодействия ограничиться учетом только единственного ближайшего соседа. В этом случае $E_{111} = 0,219U_0$, $E_{110} = 12,0U_0$. Такая разница связана с тем, что расстояние между плоскостями (111) равно $0,866a$, а расстояние между плоскостями (110) равно $0,707a$. Поскольку при $U(r) > 0$ потенциал пропорционален $1/r^{12}$, приведенная выше разница в расстояниях оказывается существенной.

Рассмотрим, наконец, семейство плоскостей $\{100\}$. На плоскости (100) узлы располагаются в вершинах квадрата со стороной a (рис. 9).

$$S_{100} = a^2.$$

Таблица 1. Плотности заполнения (заселенности) кристаллографических граней $\{hkl\}$ и энергия взаимодействия соответствующих атомных слоев

№	Семейство параллельных граней $\{hkl\}$	Заселенность грани	Энергия взаимодействия E_{hkl}/U_0
1	$\{111\}$	1,155	0,079
2	$\{110\}$	0,707	11,720
3	$\{100\}$	1,000	-0,557

Таблица 2. Углы между нормалью к грани роста (111) и направлением роста $\langle h_2k_2l_2 \rangle$

№	Семейство направлений $\langle h_2k_2l_2 \rangle$	$\cos \alpha$	α , град.
1	$\langle 100 \rangle$	$1/\sqrt{3}$	$54^\circ 44'$
2	$\langle 110 \rangle$	$\sqrt{2/3}$	$48^\circ 11'$
3	$\langle 112 \rangle$	$\sqrt{8/3}$	$19^\circ 28'$

Относительная плотность заполнения грани (100) равна

$$\rho_{100} = 1,0.$$

Расстояние между плоскостями [100] равно постоянной решетки

$$d = a.$$

Подсчитаем теперь энергию взаимодействия граней (100). В данном случае у узла есть ближайший узел соседней плоскости, четыре узла во второй координационной сфере и четыре узла в третьей координационной сфере (рис. 10). Соответствующие расстояния равны

$$r_1 = a, \quad r_2 = \sqrt{d^2 + a^2} = a\sqrt{2},$$

$$r_3 = \sqrt{d^2 + (a\sqrt{2})^2} = a\sqrt{3},$$

Энергия взаимодействия слоев (100) равна

$$E_{100} = U(r_1) + 4U(r_2) + 4U(r_3).$$

Производя вычисления, получаем

$$E_{100} = \frac{U_0}{4} \left[\frac{a^{12}}{a^{12}} - \frac{2a^6}{a^6} \right] + \\ + 4 \frac{U_0}{4} \left[\frac{a^{12}}{(2a^2)^6} - \frac{2a^6}{(2a^2)^3} \right] + \\ + 4 \frac{U_0}{4} \left[\frac{a^{12}}{(3a^2)^6} - \frac{2a^6}{(3a^2)^3} \right],$$

откуда

$$E_{100} = -0,557U_0.$$

Результаты расчета приведены в табл. 1.

Отрицательное значение E_{100} свидетельствует о притяжении между атомными слоями $\{100\}$. Итак, при небольших градиентах температуры наиболее выгодными плоскостями роста оказываются плоскости $\{111\}$, между которыми существует незначительное отталкивание. Между параллельными плоскостями $\{110\}$ отталкивание значительно, что может приводить к потере устойчивости при росте кристалла. Между плоскостями $\{100\}$ имеет место притяжение, что говорит о тенденции перехода от атомно гладкого механизма роста к атомно шероховатому.

Рассмотрим теперь влияние направления роста на формирование грани растущего кристалла. Рассмотрим случай, когда гранью роста является грань (111), как имеющая максимальную поверхностную плотность, вследствие чего при малых градиентах температуры на фронте кристаллизации формируется атомно-гладкая поверхность. Направление роста будем считать отличным от [111]. Среди направлений с малыми значениями h, k, l рассмотрим следующие: $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 112 \rangle$. Углы между нормалью к грани роста $(h_1k_1l_1)$ и направлением $\langle h_2k_2l_2 \rangle$ рассчитываем по формуле

$$\cos \alpha = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}.$$

Результаты расчета приведены в табл. 2.

Сопоставляя приведенные в таблице данные, заключаем, что из рассмотренных трех направлений роста грани (111) наименее отклоняются от нормали к грани направления $\langle 112 \rangle$. Однако, как видно из приведенных

в таблице направлений, у этого направления максимальная линейная плотность (расстояние между соседними узлами), в то время как у направления $\langle 100 \rangle$, характеризующегося минимальной линейной плотностью, самый большой угол отклонения от нормали к (111). Следовательно, если рост кристалла методом Степанова в направлении $\langle 111 \rangle$ затруднен из-за формообразователя, наиболее выгодным является рост в направлениях $\langle 110 \rangle$, что и подтверждается экспериментально. Более того, поскольку семейство направлений $\langle 110 \rangle$ содержит три направления, расположенных симметрично относительно нормали [111], в общем случае наклона фронта кристаллизации к нормали будет наблюдаться заполнение граней роста в направлениях [110], [101], [011] в порядке очередности, что приводит к образованию винтовых структур. Одна из таких структур показана на рис. 4.

В заключение отметим, что приведенные в данной статье аргументы, дающие возможное объяснение механизму образования двойников и других структур при выращивании профилированных монокристаллов кремния, применимы и к другим материалам. При выращивании кристаллов сапфира [19–21] возможен аналогичный механизм образования схожих кристаллических структур. Таким образом, в результате исследований разработана модель образования двойниковых границ в профилированных кристаллах кремния при их выращивании по способу Степанова.

Литература

1. Васильев А.М., Ландсман А.П. Полупроводниковые фотопреобразователи. М.: Советское радио, 1971. 248 с.
2. Богатов Н.М., Закс М.Б. Перспективы использования поликристаллического кремния в фотоэнергетике. Тез. докл. Всесоюз. совещ. «Перспективы развития и создания единой научно-технической, производственной и эксплуатационной базы Краснодарского края по использованию возобновляемых источников энергии и проблемы их использования в народном хозяйстве страны». Геленджик, 1988. С. 58–59.
3. Nikanorov S.P., Antonov P.I. Growth and properties of shaped crystals // Journal of Crystal Growth. 1987. Vol. 82. P. 242–249.
4. Касаткин В.В., Михеева Л.В., Ситников А.М., Паксеев Ю.Е. Фотопреобразователи на основе ленточного поликристаллического кремния // Гелиотехника. 1986. № 5. С. 14–17.
5. Chalmers B., LaBelle H.E., Mlavsky A.J. Edge-defined, film-fed crystal growth // J. Cryst. Growth 1972. Vol. 13/14. P. 84.
6. LaBelle H.E. USA Patent N 3915662. 1975.
7. Schwuttke G.H. Low cost silicon for solar energy application // Phys. Status Solidi (a). 1977. Bd. 43. No. 1. P. 43. DOI: 10.1002/pssa.2210430103
8. Татарченко В.А. Влияние капиллярных явлений на устойчивость процесса кристаллизации из расплава // Физика и химия обработки материалов. 1973. № 6. С. 4750.
9. Татарченко В.А. Устойчивый рост кристаллов. М.: Наука, 1988. 240 с.
10. Осипьян Ю.А., Татарченко В.А. Получение профилированных кристаллов кремния, исследование их электронных свойств, дефектной структуры, изготовление солнечных элементов и определение их параметров // Известия АН СССР. Сер. физ. 1983. Т. 47. № 2. С. 346–350.
11. Бузынин Ю.Н., Орлов Ю.Н., Бузынин А.Н., Дементьев Ю.С., Блеуцан Н.И., Соколов Е.Б. Выращивание и структурные особенности монокристаллических лент кремния // Известия АН СССР. Сер. физ. 1983. Т. 47. № 2. С. 361–367.
12. Абросимов Н.В., Брантов С.К., Ерофеева С.А., Зайцева А.К., Копецкий Ч.В., Марасанова Э.А., Полсан А.А., Рябиков С.В., Татарченко В.А. Получение кремниевых лент из расплава способом Степанова, исследование их свойств и изготовление на их основе фотопреобразователей // Известия АН СССР. Сер. физ. 1979. Т. 43. № 9. С. 1989–1991.
13. Ши Дж., Гейтос Г., Абросимов Н.В., Брантов С.К., Ерофеева С.А., Татарченко В.А. Некоторые структурные и электрофизические особенности кремниевых лент, полученных способом Степанова // Известия АН СССР. Сер. физ. 1979. Т. 43. № 9. С. 1992–1994.
14. Абросимов Н.В., Баженов А.В., Брантов С.К., Татарченко В.А. Профилирование кремния с использованием капиллярного формообразования. В кн.: Рост кристаллов. М.: Наука, 1986. Т. XV. С. 187–209.
15. Крицкий В.Е., Матвеев М.П., Трофименко А.Н., Хабаров Э.Н. Физические особенности замкнутых кремниевых профилей, снижающие КПД и экономическую эффективность изготовления солнечных элементов. Тез. докл. Всесоюз. совещ. «Перспективы развития и создания единой научно-технической, производственной и эксплуатационной базы Краснодарского края по использованию возобновляемых источников энергии и проблемы их использования в народном хозяйстве страны». Геленджик, 1988. С. 87–88.
16. Фаренбрух А., Бьюб Р. Солнечные элементы: Теория и эксперимент. М.: Энергоиздат, 1987.

- 280 с.
17. Богатов Н.М., Масенко Б.П., Онищук С.А. Двойниковые структуры в профилированном кремнии. Материалы Всесоюзного совещания по получению профилированных кристаллов и изделий способом Степанова и их применению в народном хозяйстве. 16–18 марта 1988 г. Ленинград, 1989. С. 199–201.
 18. Богатов Н.М., Масенко Б.П., Онищук С.А. Образование двойниковой структуры в профилированном кремнии, выращенном по способу Степанова. В межвуз. сб.: Кристаллизация и свойства кристаллов. Новочеркасск: изд. НПИ, 1989. С. 42–45.
 19. Green M.A., Emery K., King D.L. et al. Progress in Photovoltaics // Research and Applications. 2006. No. 14. P. 45–51.
 20. Green M.A., Jianhua Zhao, Wang A., Wenham S.R. Very high efficiency silicon solar cell science and technology // IEEE transactions on electron devices. 1999. No. 46. P. 1940–1947.
 21. Алферов Ж.И., Андреев В.М., Румянцев В.Д. Тенденции и перспективы развития солнечной фотоэнергетики // Физика и техника полупроводников. 2004. Т. 38. Вып. 8. С. 937–948.
 6. LaBelle H.E. USA Patent N 3915662, 1975.
 7. Schwuttke G.H. Low cost silicon for solar energy application. *Phys. Status Solidi (a)*, 1977, bd. 43, no. 1, pp. 43. DOI: 10.1002/pssa.2210430103
 8. Tatarchenko V.A. Vliyanie kapillyarnykh yavleniy na ustoychivost' protsessa kristallizatsii iz rasplava [The effect of capillary phenomena on the stability of the crystallization process from the melt]. *Fizika i khimiya obrabotki materialov* [Physics and chemistry materials processing], 1973, no. 6, pp. 4750. (In Russian)
 9. Tatarchenko V.A. *Ustoychivyy rost kristallov* [Sustainable growth of crystals]. Moscow, Nauka Pub., 1988, 240 p. (In Russian)
 10. Osip'yan Yu.A., Tatarchenko V.A. Poluchenie profilirovannykh kristallov kremniya, issledovanie ikh elektronnykh svoystv, defektnoy struktury, izgotovlenie solnechnykh elementov i opredelenie ikh parametrov [Receiving profiled crystals of silicon, study of their electronic properties, defect structure, fabrication of solar cells and determination of their parameters]. *Izvestiya AN SSSR. Seriya fizicheskaya* [Izvestiya an SSSR. A series of physical], 1983, vol. 47, no. 2, pp. 346–350. (In Russian)
 11. Buzynin Yu.N., Orlov Yu.N., Buzynin A.N., Dement'ev Yu.S., Bletskan N.I., Sokolov E.B. Vyrashchivanie i strukturnye osobennosti monokristallicheskiykh lent kremniya [Cultivation and structural characteristics of monocrystalline ribbons of silicon]. *Izvestiya AN SSSR. Seriya fizicheskaya* [Izvestiya an SSSR. A series of physical], 1983, vol. 47, no. 2, pp. 361–367. (In Russian)
 12. Abrosimov N.V., Brantov S.K., Erofeeva S.A., Zaytseva A.K., Kopetskiy Ch.V., Marasanova E.A., Polisan A.A., Ryabikov S.V., Tatarchenko V.A. Poluchenie kremnievykh lent iz rasplava sposobom Stepanova, issledovanie ikh svoystv i izgotovlenie na ikh osnove fotopreobrazovately [Obtaining a silicon ribbon from a melt by the Stepanov method, the study of their properties and fabrication on their basis of photovoltaics]. *Izvestiya AN SSSR. Seriya fizicheskaya* [Izvestiya an SSSR. A series of physical], 1979, vol. 43, no. 9, pp. 1989–1991. (In Russian)
 13. Shi Dzh., Geytos G., Abrosimov N.V., Brantov S.K., Erofeeva S.A., Tatarchenko V.A. Nekotorye strukturnye i elektrofizicheskie osobennosti kremnievykh lent, poluchennykh sposobom Stepanova [Some structural and electrical characteristics of silicon ribbons obtained by the method of Stepanov]. *Izvestiya AN SSSR. Seriya fizicheskaya* [Izvestiya an SSSR. A series of physical], 1979, vol. 43, no. 9, pp. 1992–1994. (In Russian)
 14. Abrosimov N.V., Bazhenov A.V., Brantov S.K., Tatarchenko V.A. Profilirovanie kremniya s ispol'zovaniem kapillyarnogo formoobrazovaniya *Growth*, 1972, vol. 13/14, p. 84.

References

1. Vasil'ev A.M., Landsman A.P. *Poluprovodnikovye fotopreobrazovateli* [Semiconductor photovoltaics]. Moscow, Sovetskoe radio, 1971, 248 p. (In Russian)
2. Bogatov N.M., Zaks M.B. Perspektivy ispol'zovaniya polikristallicheskogo kremniya v fotoenergetike [Prospects for the use of polycrystalline silicon in photovoltaic]. In: *Tezisy dokladov Vsesoyuznogo soveshchaniya "Perspektivy razvitiya i sozdaniya edinoy nauchno-tekhnicheskoy, proizvodstvennoy i ekspluatatsionnoy bazy Krasnodarskogo kraya po ispol'zovaniyu vozobnovlyаемых istochnikov energii i problemy ikh ispol'zovaniya v narodnom khozyaystve strany"* [Theses of reports all-Union meeting "Prospects for the development and creation of a uniform scientific-technical, production and operational base in Krasnodar region on the use of renewable energy sources and the problems of their use in national economy"]. Gelendzhik, 1988, pp. 58–59. (In Russian)
3. Nikanorov S.P., Antonov P.I. Growth and properties of shaped crystals. *J. of Crystal Growth*, 1987, vol. 82, pp. 242–249.
4. Kasatkin V.V., Mikheeva L.V., Sitnikov A.M., Pakseev Yu.E. Fotopreobrazovateli na osnove lentochnogo polikristallicheskogo kremniya [Photovoltaics based on polycrystalline silicon ribbon]. *Geliotekhnika* [Solar Engineering], 1986, no. 5, pp. 14–17. (In Russian)
5. Chalmers B., LaBelle H.E., Mlavsky A.J. Edge-defined, film-fed crystal growth. *J. Cryst.*

- [Profiling of silicon using capillary morphogenesis]. In: *Rost kristallov* [The growth of crystals]. Moscow, Nauka Pub., 1986, vol. XV, pp. 187–209. (In Russian)
15. Kritskiy V.E., Matveyakin M.P., Trofimenko A.N., Khabarov E.N. Fizicheskie osobennosti zamknutykh kremnievykh profiley, snizhayushchie KPD i ekonomicheskuyu effektivnost' izgotovleniya solnechnykh elementov [Physical features of confined silicon profiles, reducing efficiency and economic efficiency of manufacture of solar cells]. In: *Tezisy dokladov Vsesoyuznogo soveshchaniya "Perspektivy razvitiya i sozdaniya edinoy nauchno-tekhnicheskoy, proizvodstvennoy i ekspluatatsionnoy bazy Krasnodarskogo kraya po ispol'zovaniyu vozobnovlyаемых источников энергии i problemy ikh ispol'zovaniya v narodnom khozyaystve strany"* [Theses of reports all-Union meeting "Prospects for the development and creation of a uniform scientific-technical, production and operational base in Krasnodar region on the use of renewable energy sources and the problems of their use in national economy"]. Gelendzhik, 1988, pp. 87–88. (In Russian)
 16. Farenbrukh A., B'yub R. Solnechnye elementy: Teoriya i eksperiment [Solar cells: Theory and experiment]. Moscow, Energoizdat Pub., 1987, 280 p. (In Russian)
 17. Bogatov N.M., Masenko B.P., Onishchuk S.A. Dvoynikovye struktury v profilirovannom kremnii [A duplex structure in profiled silicon]. *Materialy Vsesoyuznogo soveshchaniya po polucheniyu profilirovannykh kristallov i izdeliy sposobom Stepanova i ikh primeneniyu v narodnom khozyaystve* [Proc. of all-Union meeting on receipt of the shaped crystals and products by the Stepanov method and their application in the national economy]. March 16–18, 1988. Leningrad, 1989, pp. 199–201. (In Russian)
 18. Bogatov N.M., Masenko B.P., Onishchuk S.A. Obrazovanie dvoynikovoy struktury v profilirovannom kremnii, vyrashchennom po sposobu Stepanova [The formation of a duplex structure in profiled silicon grown by the Stepanov method]. In: *Krystallizatsiya i svoystva kristallov* [Crystallization and properties of crystals]. Novocheerkassk, Izd. NPI Pub., 1989, pp. 42–45. (In Russian)
 19. Green M.A., Emery K., King D.L. et al. Progress in Photovoltaics. *Research and Applications*, 2006, no. 14, pp. 45–51.
 20. Green M.A., Jianhua Zhao, Wang A., Wenham S.R. Very high efficiency silicon solar cells: science and technology. *IEEE transactions on electron devices*, 1999, no. 46, pp. 1940–1947.
 21. Alferov Zh.I., Andreev V.M., Rumyantsev V.D. Tendentsii i perspektivy razvitiya solnechnoy fotoenergetiki [Trends and prospects of solar photovoltaics]. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Trends and prospects of solar photovoltaics], 2004, vol. 38, iss. 8, pp. 937–948. (In Russian)