

DESIGN AND SIMULATION OF NOVEL GaInP/GaAs/Ge STRUCTURE FOR MULTI-JUNCTION SOLAR CELLS

*Alexey Denisov**, *Dario Albino Carnelli***, *Davide Sacchetto***, *Liqiang Zheng***,
*Luigi Di Lillo***, *Pallavi Reddy***, *Salvatore Fisichella***, *Xinxin An***

*** - Grenoble INP (Grenoble Institute of Technology, France)*

** - BMSTU, IU4, Russia.*

Abstract

The project is aimed at research and development of *GaInP/GaAs/Ge* triple-junction solar cells. Third generation of solar cells was chosen as the basis for the structure design. After the specifications of the third generation solar cell were clearly defined, overall simulation of the structure was performed: physical simulation of the device, finite element analysis, the electrical simulation and design. Finally, perspectives and application of *GaInP/GaAs/Ge* triple-junction solar cells were discussed.

1. INTRODUCTION

A solar cell (or a "photovoltaic" cell) is a device that converts photons from the sun (solar light) into electricity using electrons. In general, a solar cell that includes the capacity to capture both solar and nonsolar sources of light (such as photons from incandescent bulbs) is termed a photovoltaic cell. Fundamentally, the device needs to fulfill only two functions: photogeneration of charge carriers (electrons and holes) in a light-absorbing material, and separation of the charge carriers to a conductive contact that will transmit the electricity. This conversion is called the photovoltaic effect, and the field of research related to solar cells is known as photovoltaics.

Solar cells have many applications. Historically solar cells have been used in situations where electrical power from the grid is unavailable, such as in remote area power systems, Earth orbiting satellites or space probes, consumer systems, e.g. handheld calculators or wrist watches, remote radiotelephones and water pumping applications. Recently solar cells are particularly used in assemblies of solar modules (photovoltaic arrays) connected to the electricity grid through an inverter, often in combination with a net metering arrangement.

Solar cells are regarded as one of the key technologies towards a sustainable energy supply.

Third generation solar cells

Third generation photovoltaics are broadly defined as semiconductor devices which do not rely on a traditional p-n junction to separate photogenerated charge carriers. Third generation solar cells are able to exceed the Shockley-Queisser limit (efficiency > 31%).

The aim of the approaches of the third generation is to reduce the cost per Watt of "thin film" second generation technologies by increasing the efficiency of the photovoltaic devices with only a small increasing in area costs.

Means to overcome this limit have been variously quoted. They are divided into three generic categories, namely: multiple energy threshold devices; modification of the incident spectrum; and use of excess thermal generation to enhance voltages or carrier collection.

2. PHYSICAL PRINCIPLES

Multi-junction solar cells

Single-junction devices perform optimally at the wavelength equal to the bandgap, inherently losing efficiency at all other wavelengths across the solar spectrum. Multi-junction devices stack different solar cells, with multiple bandgaps tuned to utilize the entire spectrum [1]. Light is first incident upon a wide bandgap device that can produce a relatively high voltage and thereby make better use of high-energy photons, then lower-energy photons pass through to narrow bandgap sub-devices that can absorb the transmitted *IR*-photons. Maximum efficiencies of 55.9%, 63.8%, and 68.8% are predicted for two- (tandem), three- and four-junction devices. However, costs escalate as fabrication becomes increasingly problematic with the growing number of interfaces and cells.

Material systems based on *GaAs*, *InP* or *GaN* can use different compositions of aluminum or indium alloys to modify bandgaps, while maintaining lattice constants (bandgap engineering) and can produce monolithic multi-junction devices in a single growth run (with tunnel junctions between each device). In more pragmatic devices, multi-junction cells are mechanically stacked, with devices bonded together at the end of the process.

Quantum dot intermediate band solar cell (QD-IBSC)

The performance of a conventional ISBC is based on the properties of a semiconductor-like material which is characterized by the existence of an IB located within what would otherwise be its conventional band gap [2]. The improvement in efficiency of the cell arises from its potential to absorb below band gap energy photons and thus produce additional photocurrent and to inject this enhanced photocurrent without degrading its output photovoltage by means of QDs. An IB material is characterized by the existence of a collection of energy states located within what would be the forbidden gap of a conventional semiconductor. To manufacture an IB solar cell the IB material has to be sandwiched between conventional p and n semiconductor emitters that isolate the IB from the contact. QDs are means for producing the intermediate band. In an array of QDs, the IB would arise from the confined electron states of potential wells that are created by the conduction band between dot and barrier materials.

Hot carrier solar cells

The Hot Carrier Cell tackles the major PV loss mechanism that is the thermalisation of carriers [1][3]. The underlying concept is to slow the rate of photoexcited carrier cooling, caused by phonon interaction in the lattice, to allow time for the carriers to be collected whilst they are still “hot” thus enhancing the voltage of a cell. Hence the reduced dimensionality in nanostructures offers a promising route for such a role as they restrict the number of acoustic mode phonons available because of the Brillouin zone folding that occurs as a result of the periodicity of the superlattice. A superlattice is a material with periodically alternating layers of several substances. Such structures possess periodicity both on the scale of each layer's crystal lattice and on the scale of the alternating layers.

3. GaInP/GaAs/Ge TRIPLE-JUNCTION CELL STRUCTURE

In order to understand the architecture of the device, which is developed, single basic solar cell has to be considered. A simple cell is essentially a p-n junction that, exposed to the sunlight, is able to collect incident radiations and to convert them in electron-hole pairs that are accelerated toward the electrodes. According to the material used, and the doping concentration of the junction, it is possible to have adsorption at certain range of wavelength but reflection or transmission at other wavelength. The idea is to start from different kind of solar cells with complementary adsorption spectra and to let them working together to accumulate energy from a wider range of frequencies.

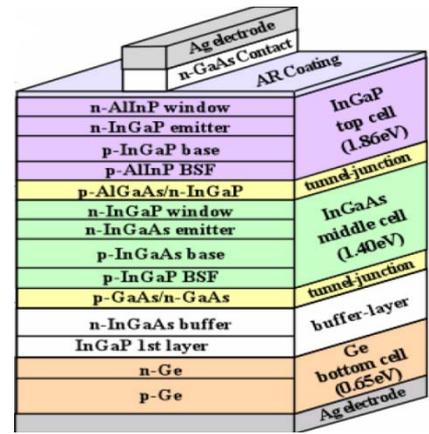


Fig. 2.1. Tandem solar cell structure

The concept of triple-junction solar cell is shown in Fig. 3.1. The architecture of the device, which is developed, is shown in Fig. 3.2. The *GaInP/GaAs/Ge TJ* cell structure has the advantages of the *GaInP/GaAs* double-junction tandem solar cell, and has the additional advantage that it is grown on a low-cost *Ge* substrate [4]. The n-on-p design provides enhanced radiation hardness, and allows an elegant upgrade path to a TJ cell simply by depositing the upper cell layers on a p-type *Ge* substrate and forming an active junction in the substrate by in situ arsenic diffusion. Tunnel junctions are used to link the individual *Ge* bottom, *GaAs* middle and *GaInP* top cells.

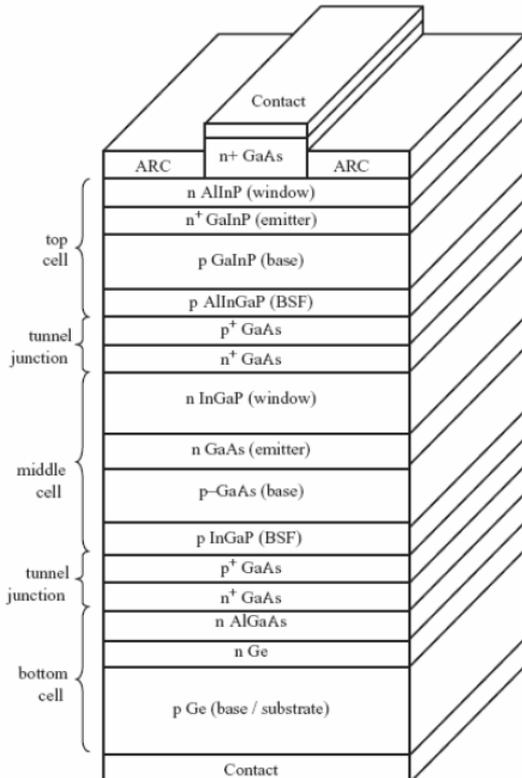


Fig. 3.2. *GaInP/GaAs/Ge* triple-junction cell structure

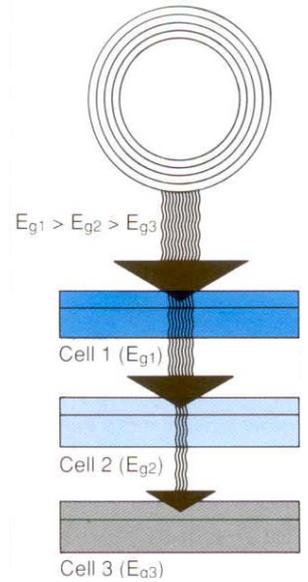


Fig. 3.1. Concept of triple-junction solar cell

There are different layers in the structure, some of them actually necessary, such as the tunnel junction, and some of them are used to enhance the conversion of the light and they directly affect the adsorption coefficient of the entire structure:

- window layers are used to increase the intensity of photons entering in the intrinsic junction;
- BSF (Back Surface Field) layers are used as an excellent minority carrier mirror; they have high-bandgap that reduces recombination effects due to surface defects, shifting the electron-hole pair generation to places nearer the junction.

The disposition of these cells is not arbitrary, they are needed to put in particular order, starting from the one which adsorbs higher wavelength (because the lower energy waves are adsorbed usually on the surface of the sunlight exposed devices) and finishing with the junction that adsorbs lower wavelength.

4. SIMULATION OF THE DEVICE

4.1. Physical simulation

4.1.1. Introduction

In order to simplify the problem, the whole TJ structure was divided into three parts. Each of them is a p-n junction. The optical response and the optical parameters of the first cell have been investigated. In particular: the first cell absorbs a certain spectral range of the solar spectrum; the solar spectrum which not absorbed will be transmitted through it and will represent the incident photon flux of the second cell. Step by step applying the same methodology for each subcell (simply by defining the incident photon flux of each subcell) the following important parameters have been calculated:

1. absorption coefficient $\alpha(\lambda)$ computation by using quantum physics;
2. computation of the depletion region width w ;
3. simple derivation of the optical power $P(w)$;
4. calculation of the primary photocurrent I_p ;
5. external quantum efficiency EQE ;
6. reflective coefficient;
7. internal quantum efficiency;
8. computation of the spectral responsivity SR .

In the following pages $\alpha(\lambda)$ will be derived both for direct band gap and indirect band gap¹ materials by using quantum optics.

In the structure, which is developed in the project, *InGaP* and *GaAs* are direct band gap semiconductor while *Ge* is an indirect band gap semiconductor.

Clarification: the calculus of the depletion region width derives from the fact that the electrons e^- produced by incident photons are accelerated only in that region because the built-in potential that arises from the junction formation is localized in that region. For the calculation the reasonable and usual assumption is made: far from that region the semiconductors are neutral \rightarrow zero electric field \rightarrow constant voltage.

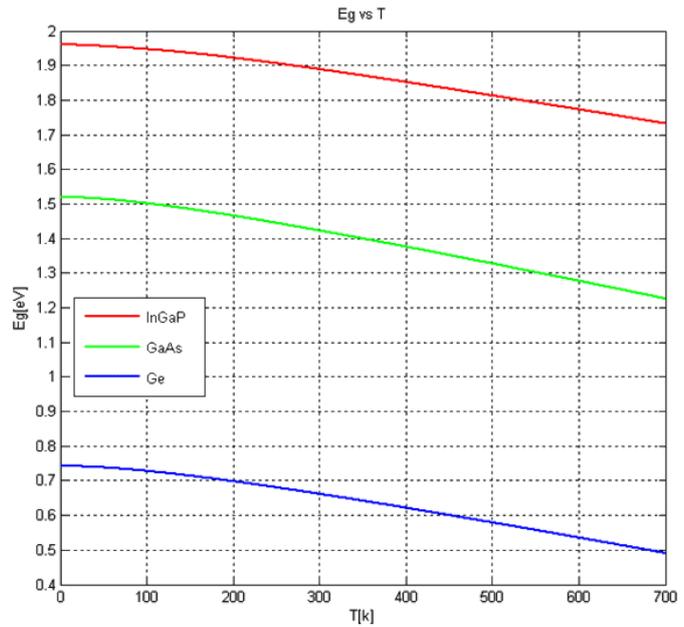


Fig. 4.1.1. Energy gap as a function of temperature for each layer

4.1.2. Absorption coefficient computation

The meaning on direct and indirect band gap is explained with a help of Fig. 4.1.2 and Fig. 4.1.3.

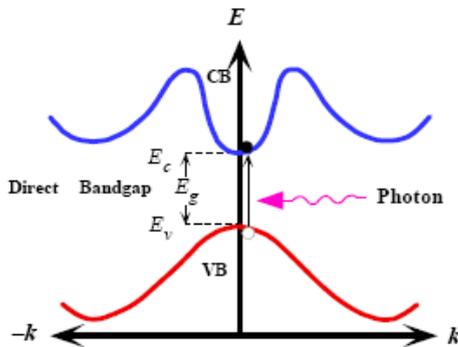


Fig. 4.1.2. Direct band gap energy band diagram

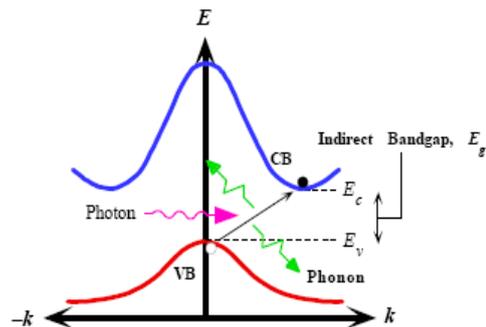


Fig. 4.1.3. Indirect band gap energy band diagram

As it is possible to see from Fig. 4.1.2 [5], direct band gap semiconductor means that E_V and E_C are characterized by the same k value. So if only edge-edge transitions are considered they happen with momentum conservation: $p = \hbar \cdot k$ ². In this case the absorption of a photon with a proper energy, that is with $E = \hbar \cdot \omega = h \cdot \nu = \frac{h \cdot c}{\lambda} \geq E_g$, causes an increasing of the electron's energy that jumps to some free states of the conduction band. In particular it is considered for the extraction of the absorption coefficient only edge-edge transition in order to simplify the problem. However this approximation is quite reasonable: in fact, except for some multiplicative constants, the behaviour of the absorption coefficient fits very well the experimental measurements [4].

¹ In fig. 4.1.1 the temperature dependence of the energy gap for each layer is highlighted. The reason for this insertion is that all the principal physics parameters are strongly dependent on these curves

² $\hbar = \frac{h}{2 \cdot \pi}$ where h is the Planck constant

Observation: also in direct band gap semiconductor there will be some not-conservative k transitions, due to the presence of particles associated to the thermal vibration of the lattice (called phonons), but the probability that they occur is much lower than conservative transitions.

In indirect band gap semiconductor the absorption of a photon with a proper energy causes the “promotion” of e^- to the minimum of the conduction band (always supposing edge-edge transition). However in this transition there is not k conservation, so there is no momentum conservation. This kind of transition is caused by the absorption or an emission of a phonon with a proper energy $\hbar \cdot \omega_q$.

4.1.3. Direct band gap semiconductor: absorption coefficient

It is required to define a wave function Ψ_n which describes the e^- in the 3-D space around nucleus. Or better: the square modulus of the wave function $|\Psi_n(r, t)|^2$ gives the probability to find the e^- in the position r at the time instant t .

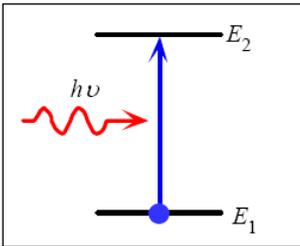


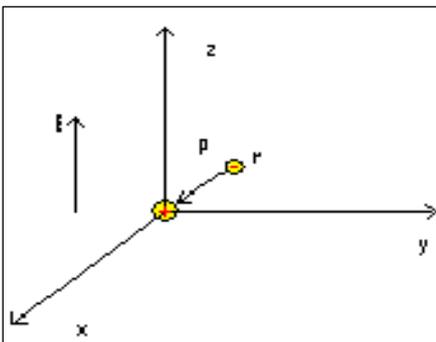
Fig. 4.1.4. Electron transition

An electromagnetic wave (photons) with a proper energy will interact with the e^- that lies on the ground level E_1 . The photons are absorbed and the electrons can transit to the energy level E_2 (Fig. 4.1.4 [5]).

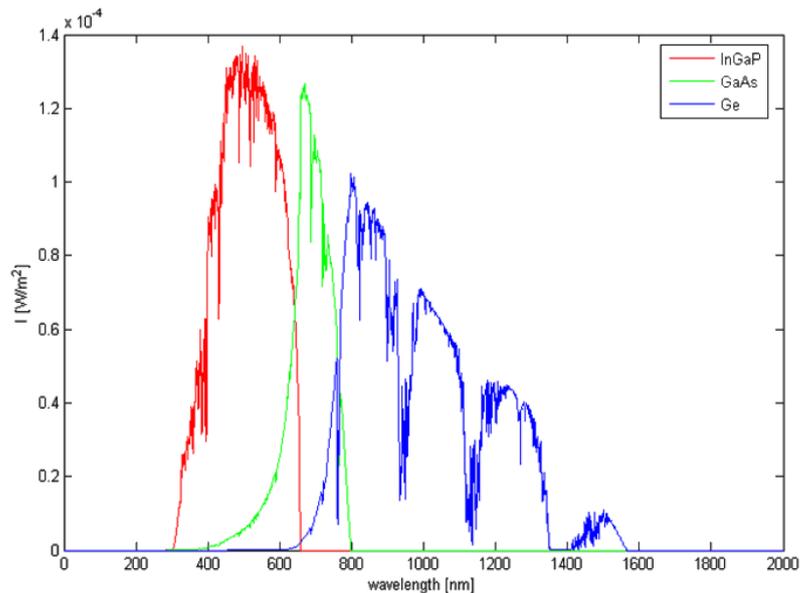
For the two levels system upset by an electromagnetic wave, the first energy level E_1 is described by the following wave function:

$$\Psi_1(r) \cdot e^{\frac{-i \cdot E_1 \cdot t}{\hbar}}$$

The second one is described by the wave function shown below:



apply the perturbation theory:



$$\Psi_2(r) \cdot e^{\frac{-i \cdot E_2 \cdot t}{\hbar}}$$

The wave function that describes this system with transitions (so that describes the passage from one stationary state to another one), will be solution of the Schrödinger equation:

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) = H \cdot \Psi(r, t),$$

where H is the Hamiltonian operator. Here it is required to

$$H = H_0 + H_{em}$$

Fig. 4.1.6. Representation of a dipole momentum p in presence of an external field E

$$H_0 = E_c + E_v = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(\vec{r})$$

H_{em} is the Hamiltonian that takes into account the interaction of the e^- with the electromagnetic wave. It represents the energy of interaction of the e^- with the electromagnetic wave \rightarrow it has to be read from a quantum point of view.

Now this interaction has to be modelled first classically and then the result will be exported in quantum. The dipole momentum p is characterized by a positive charge in the origin of the system of reference (Fig. 4.1.6). An electric field \vec{E} in the proximity of the dipole momentum can be turned on. The energy of interaction of the dipole with the electric field will be:

$$\varepsilon = -p \cdot \vec{E} = e \cdot r \cdot \vec{E}.$$

The field \vec{E} is the field of a plane wave:

$$\vec{E}(r, t) = 2 \cdot E_0 \cdot \cos(k \cdot r - \omega \cdot t),$$

where k is the plane wave direction and ω is the frequency.

It is more convenient to write \vec{E} in the following way:

$$\vec{E}(r, t) = E_0 \cdot \left\{ e^{i(k \cdot r - \omega t)} + e^{-i(k \cdot r - \omega t)} \right\}$$

Hence:

$$\varepsilon = -p \cdot \vec{E} = e \cdot r \cdot E_0 \cdot \left\{ e^{i(k \cdot r - \omega t)} + e^{-i(k \cdot r - \omega t)} \right\}$$

This equation has to be written in a quantum way. Only \vec{r} has a correspondent operator.

The new Hamiltonian for the Schrödinger equation is:

$$H(r, t) = H_0 + H_{em} = H_0 + e \cdot r \cdot \vec{E}(r, t)$$

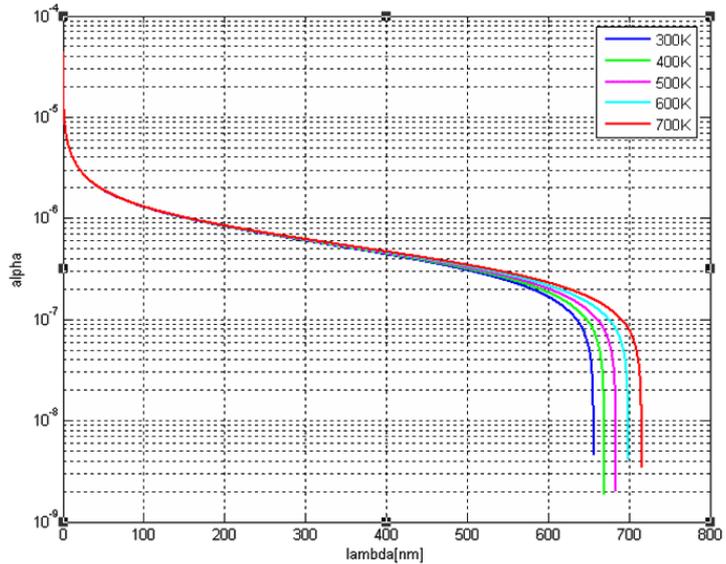
So now the Schrödinger equation with this Hamiltonian has to be solved. By making some approximation the absorption coefficient can be obtained:

$$\alpha(\lambda) = const \cdot (\hbar\omega - E_g)^{\frac{1}{2}} \approx (\hbar\omega - E_g)^{\frac{1}{2}}$$

It is possible to see that $\alpha(\lambda)$ strongly depends on the energy of the incident photons and from the energy band gap of the material chosen.

In Fig. 4.1.7 there is an example of the absorption coefficient behaviour as a function of wavelength using the theory result. In particular the strong dependence of α from the energy gap that depends from temperature is underlined.

In Fig. 4.1.8 the behaviour of the adsorption coefficient for each layer of our device is represented. It is possible to notice how do the orders of magnitude of the absorption coefficient for the layers constituting the structure differ: not too much between the first two layers but in particular for the germanium cell (bottom cell). Temperature dependence of the absorbance



properties of the layers is highlighted. To get these curves the model of Shubert and Kurtz has been used [6].

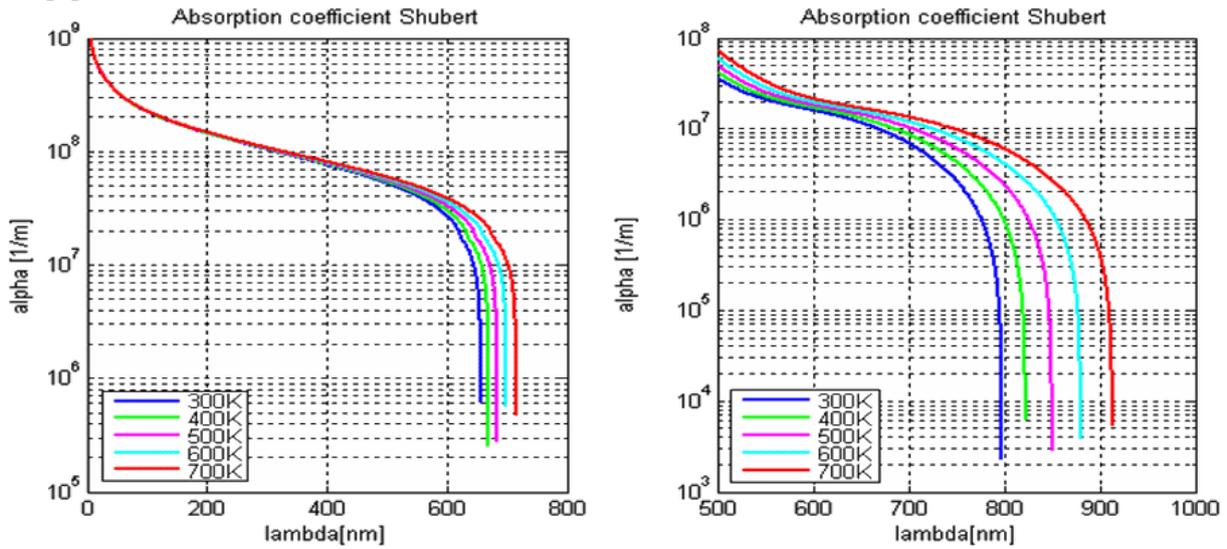


Fig. 4.1.8. Absorption coefficient as a function of the wavelength for: InGaP (left) GaAs (right)

4.1.4. Indirect band gap semiconductor: absorption coefficient

The model for the absorption coefficient that foresees transitions without k conservation, that is with $k_i \neq k_f$ has to be developed (here only the planning of the Hamiltonian and the final result are written). The lattice vibration has to be taken into account, that is the atoms due to thermal energy are not fixed in their equilibrium position but they move just like a spring. It means that the e^- not only interact with the photons but also with the lattice vibration. At these lattice vibrations are associated some particles called phonons.

The way is the following: the Hamiltonian of a system which is not lighted but which has to be taken into account the for the lattice vibrations is:

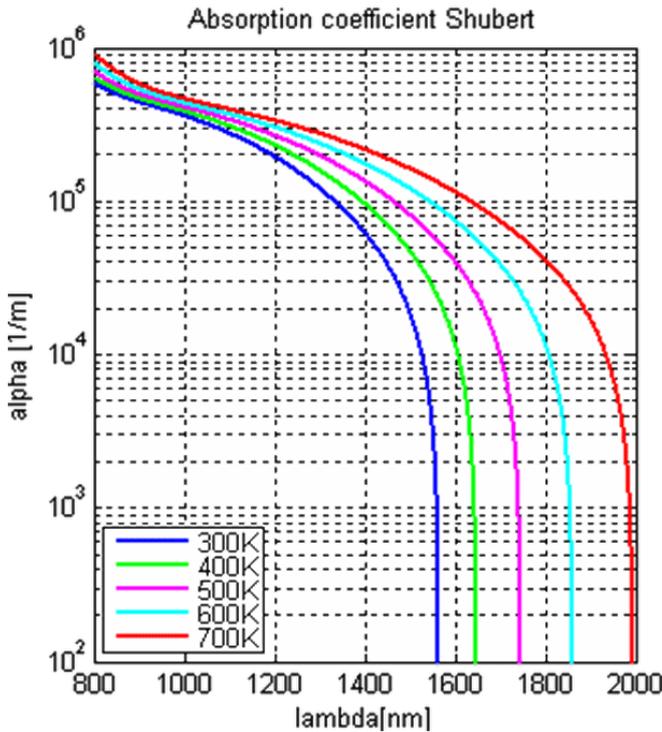


Fig. 4.1.9. Absorption coefficient in the last cell (Ge)

$$H_0 = E_c + E_v = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \Delta + V \left(\vec{r} - R \right) = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V \left(\vec{r} - R \right)$$

The first term represents the kinetics energy of e^- , while the second term is the potential energy of the e^- that depends on:

- \vec{r} represents the effective position of the e^-

- R represents the position of the reticular sites \rightarrow equilibrium position.

It is evident, that the effective position of the atoms depends on the temperature. In fact at $T = 0[K]$ all the atoms are in the lattice sites, so $R = const. = R_0 \rightarrow R_0$ represents the position of the reticular sites at the equilibrium.

For $T > 0[K]$ $R(t)$ appears, that is the position of the reticular site changes according to the time.

$$\text{So for } T > 0[K], H_0 = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \Delta + V\left(\vec{r} - R_0 - \delta R\right),$$

where δR is a little displacement respect to the equilibrium.

If the material is lit, the Hamiltonian of solid-light interaction has to be added:

$$H(r, t) = H_0 + H_{em} = H_0 + e \cdot r \cdot E(r, t)$$

The total Hamiltonian, out equilibrium and at $T > 0[K]$ will be:

$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \Delta + V\left(\vec{r} - R_0 - \delta R\right) + H_{em} \rightarrow$ the electrons interact both with the photons and with the lattice vibrations.

The Hamiltonian can be written in this way:

$H(r, t) = H_0 + H_{em} + H_{el} \rightarrow H_0(T = 0[K])$ is the Hamiltonian of the lattice frozen and to the dark, so the electrons do not interact neither with photons nor with lattice vibrations; H_{em} is the Hamiltonian that models the e^- - photons interactions; H_{el} is the Hamiltonian that models the e^- - phonons interactions. H_{em} and H_{el} are perturbations to the equilibrium. Hence:

$$H(r, t) = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \Delta + V\left(\vec{r} - R_0\right) + \left\{ \left[V\left(\vec{r} - R_0 - \delta R\right) - V\left(\vec{r} - R_0\right) \right] + e \cdot r \cdot E(r, t) \right\}$$

The second term represents the Hamiltonian of perturbation: H_p .

The Schrödinger equation that was solved, making some approximations is:

$$\left[H_0 + p \cdot H_p \right] \Psi(r, t) = i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t)$$

The results which was found is shown below:

$\alpha_{abs}(\lambda) \approx n_q \cdot (\hbar\omega - E_g + \hbar\omega_q)^2$ $\alpha_{emis}(\lambda) \approx (n_q + 1) \cdot (\hbar\omega - E_g - \hbar\omega_q)^2$	<p>The first result $\alpha_{abs}(\lambda)$ represents the absorption coefficient with the absorption of a phonon. The second one $\alpha_{emis}(\lambda)$ represents the absorption coefficient with the emission of a phonon.</p>
--	---

These two results have a different dependence on the temperature. The reason is that: $n_q \approx \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{K_B \cdot T}} - 1}$ is the Bose – Einstein distribution (it is the energy density but also the number of phonons at the disposal) that depends strongly on the T .

Hence: For $T = 300[K]$ the indirect absorption coefficient $\alpha_{indirect} \approx \alpha_{abs}(\lambda) + \alpha_{emis}(\lambda)$ is dominated by the emission term, while another one is negligible.

4.1.5. Depletion region width computation

The calculation of the depletion region (SCR) could be reasonable, since the electrons-holes produced by the impinging photons are accelerated in this region (Fig. 4.1.10 [7]).

It is known that from the formation of the junction the potential drop called built-in potential and localized at the edge of the SCR arises.

The built-in potential is:

$$V_{bi} = \frac{q \cdot N_a \cdot x_p^2}{2 \cdot \epsilon_s} + \frac{q \cdot N_d \cdot x_n^2}{2 \cdot \epsilon_s}$$

The total extension of the depletion region is $w = x_n + x_p$, where x_n represents the extension of the SCR in the n-doped layer, while x_p is the extension of the SCR in the p-doped layer.

With few line of calculations: $x_d = \sqrt{\frac{2 \cdot \epsilon_s \cdot V_{bi}}{q \cdot N_{eq}}}$ with $N_{eq} = \frac{N_a \cdot N_d}{N_a + N_d}$.

Important consideration: the built in potential V_{bi} can be written also in this way:

$V_{bi} = \frac{K_B \cdot T}{q} \ln\left(\frac{N_a \cdot N_d}{n_i^2}\right)$. It means that the SCR width x_d depends strongly on the temperature.

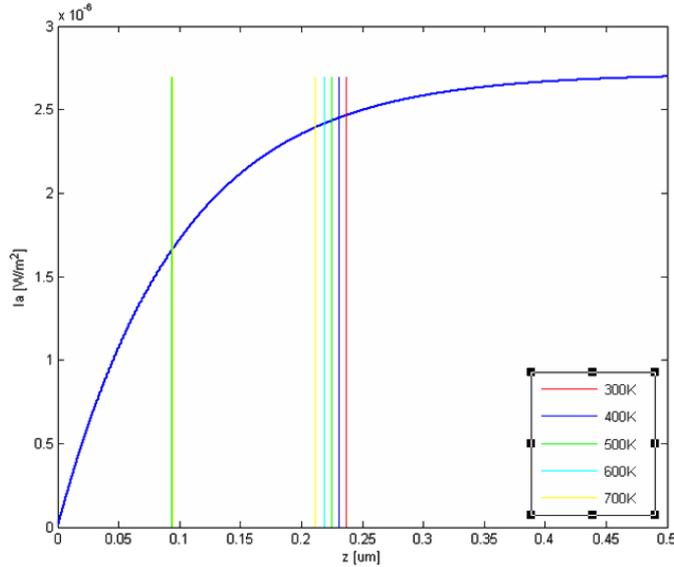


Fig. 4.1.11. Absorbed intensity as a function of the variation of the SCR

4.1.6. Optical power $P(w)$

The intensity transmitted through a layer of thickness d is $I_t(d) = I_0 \cdot e^{-\alpha(\lambda)d}$. The region of interest is the depletion region and intensity absorbed in this region: $I_t(d) = I_0 \cdot (1 - e^{-\alpha(\lambda)d})$, where I_0 represents the incident light intensity (the whole solar spectrum for the simulation was used) and $\alpha(\lambda)$ is the absorption coefficient.

It is quite simple to pass from the intensity to the optical absorbed power. In fact, in general:

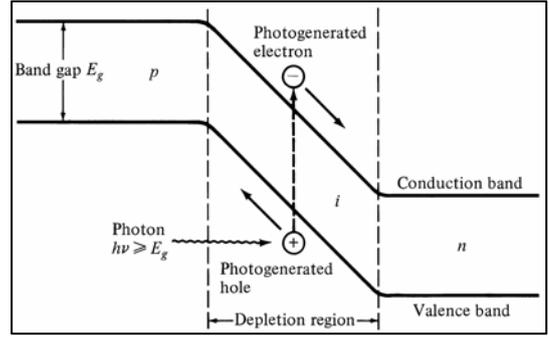


Fig. 4.1.10. Schematic view of carriers in an illuminated sample

$$Intensity = \frac{Energy}{S \cdot t} = \frac{Power}{S},$$

where S is the surface and t is the time.

So, the power absorbed in the depletion region $P(w)$ is:

$$P(w) = P_0(1 - e^{-\alpha(\lambda) \cdot w}),$$

where w is the depletion region width.

From the formula, it is possible to see that the optical power absorbed $P(w)$ depends mainly on SCR width and $\alpha(\lambda)$. But $\alpha(\lambda)$ depends on the energy of incident photons and on the energy gap. The energy gap depends on the temperature. Also the depletion region width, as already said, will depend strongly on the temperature.

Fig. 4.1.12 clarifies this behaviour. It is possible to figure out what is the power adsorbed in each layer and what is the influence of temperature on it. It is also possible to notice that the power adsorbed in the first layer is higher than the in the others and it is quite more sensitive to temperature variation.

During the calculations the reflective coefficient R of the layer was neglected. By considering it the available optical power would become:

$$P(w) = P_0(1 - e^{-\alpha(\lambda) \cdot w}) \cdot (1 - R).$$

4.1.7. Primary Photocurrent I_p

The primary photocurrent is the current produced by the photons absorbed in the SCR. It was derived directly from the $P(w)$. The idea is the following:

in general the current density vector \vec{J} is given by the product of the electron charge q with a flux. In the case of the current structure this flux will be the photon flux $F(\lambda)$.

So:

$$F(\lambda) = \frac{Intensity}{Energy} = \frac{particles}{S \cdot t} = \frac{P(w)}{h \cdot \nu \cdot S}$$

→ the flux gives the number of photons for unit surface for time unit.

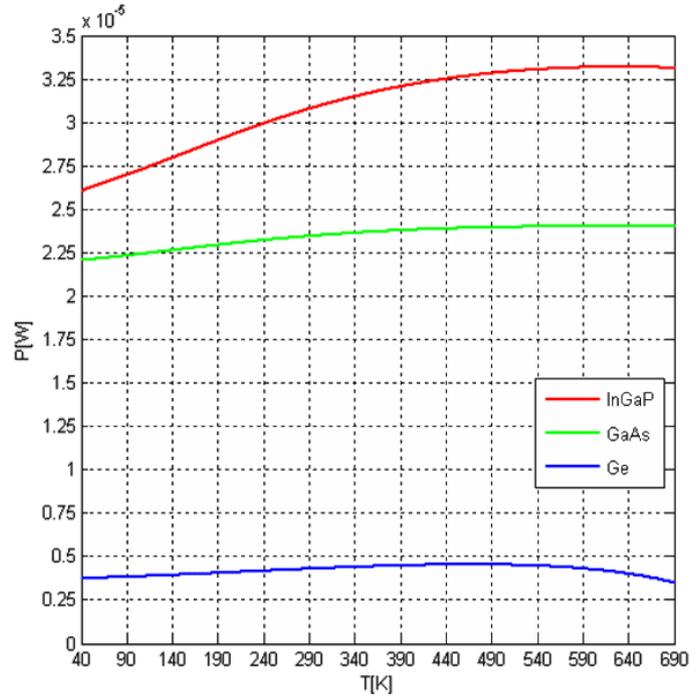


Fig. 4.1.12. Absorbed power as function of temperature for different layers

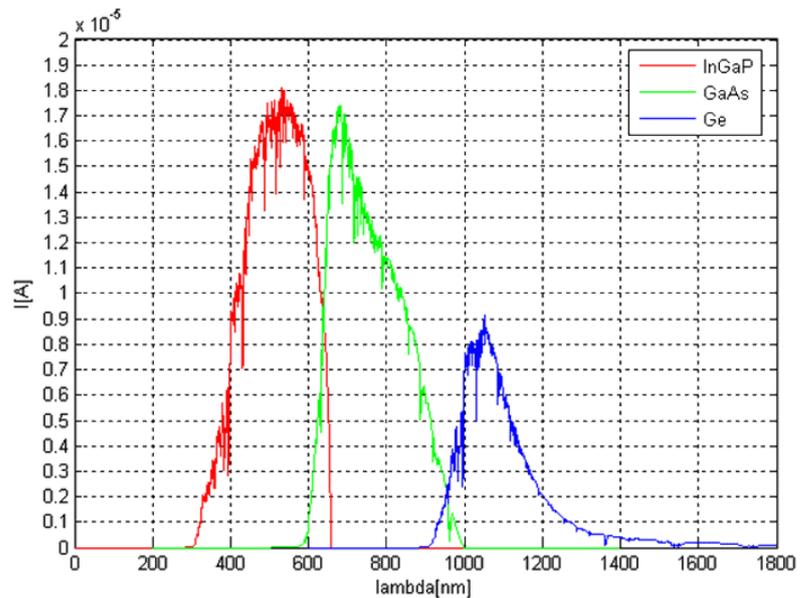


Fig. 4.1.13. Primary photocurrent produced as a function of wavelength for each layer

Then:

$$\vec{J} = q \cdot F(\lambda) = \frac{q \cdot P(w)}{h \cdot \nu \cdot S}$$

$$I = \int_S \vec{J} \cdot \vec{n} \cdot dS = \vec{J} \cdot S$$

Thus :

$$I_p = \frac{q \cdot P(w)}{h \cdot \nu} = \frac{q \cdot P(w) \cdot \lambda}{h \cdot c}$$

This formula was implemented in MATLAB. As it is possible to see, there is a dependence of the current produced from:

- the optical power absorbed:
 - depends on the absorption coefficient \rightarrow depends on the energy of the incident photon and on the energy gap \rightarrow then on the temperature.
 - depends on the depletion region width that depends on the doping concentration of the layers and on the built-in potential, so on the temperature.
- the wavelength λ of the incident photons.

4.1.8. External quantum efficiency EQE

The EQE is the current obtained outside the device per incoming photon, so it is:

$$EQE = \frac{\text{number of } e^- \text{ produced}}{\text{number of incoming photons}} = \frac{\text{current} / \text{electron charge}}{\text{total incident power} / \text{energy of one photon}}$$

It is quite simple to obtain it because I_p is already known and also the incident power P_o is known:

$$EQE(\lambda) = \frac{I_p / q}{P_o / h \cdot \nu} = \frac{I_p}{q} \cdot \frac{h \cdot c}{P_o \cdot \lambda}$$

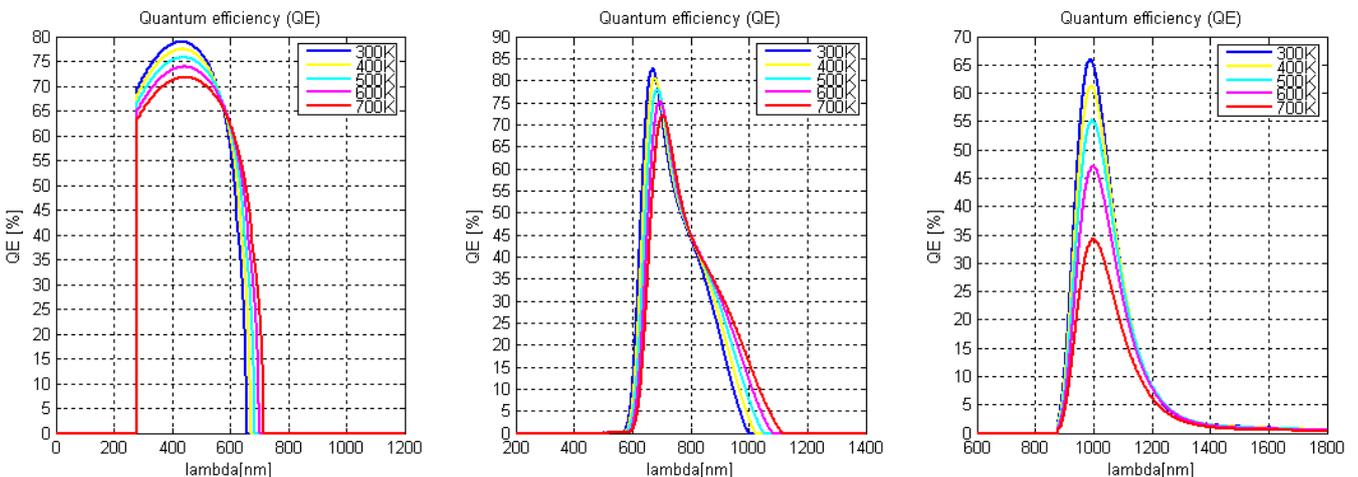


Fig. 4.1.14. Quantum Efficiency as a function of wavelength for different temperatures: InGaP (left), GaAs (center), Ge (right)

In Fig. 4.1.14 the temperature dependence of the Quantum efficiency for each cell is shown. In is possible to notice how the temperature influence is higher for the Germanium cell than in the others and also that there is a shift for higher wavelength as with the temperature increase.

In order to compute the internal quantum efficiency $IQE(\lambda)$ total device reflectance $R(\lambda)$ should be known, since:

$$IQE(\lambda) = \frac{EQE(\lambda)}{[1 - R(\lambda)]}$$

As was mentioned previously the device reflectance was neglected.

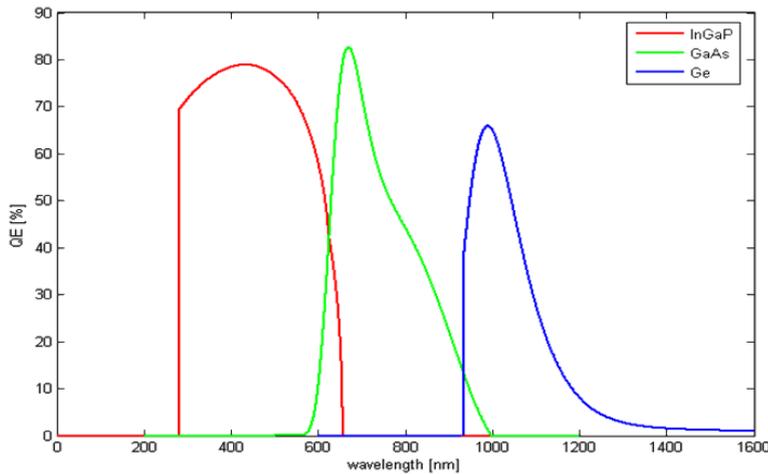


Fig. 4.1.15. Global view of the quantum efficiency at 300K

In Fig. 4.1.15 quantum efficiency for the entire device is plotted. As it is seen, the most efficient cell is the InGaP cell (it presents an higher subtended area than the other cells) and that the less efficient is the Ge cell. In particular it is possible to point out an overlap between curves near the bandgap energy. It means that the first layer lets residual intensity to pass towards the second layer for energies near the energy gap of the first layer.

4.1.9. Computation of the spectral responsivity SE

The ratio between the electrical output I_p and the optical input P_0 represents the SE .

$$SE = \frac{I_p}{P_0} [A/W]$$

Simply by replacing the values previously found:

$$SE = \frac{I_p}{P_0} = \frac{q \cdot P(w) \cdot \lambda}{h \cdot c \cdot P_0} = \frac{q \cdot P_0 (1 - e^{-\alpha(\lambda) \cdot w}) \cdot \lambda}{h \cdot c \cdot P_0} = \frac{q \cdot (1 - e^{-\alpha(\lambda) \cdot w}) \cdot \lambda}{h \cdot c} = \frac{EQE \cdot q}{h \cdot \nu}$$

So this parameter is strongly related to the quantum efficiency EQE .

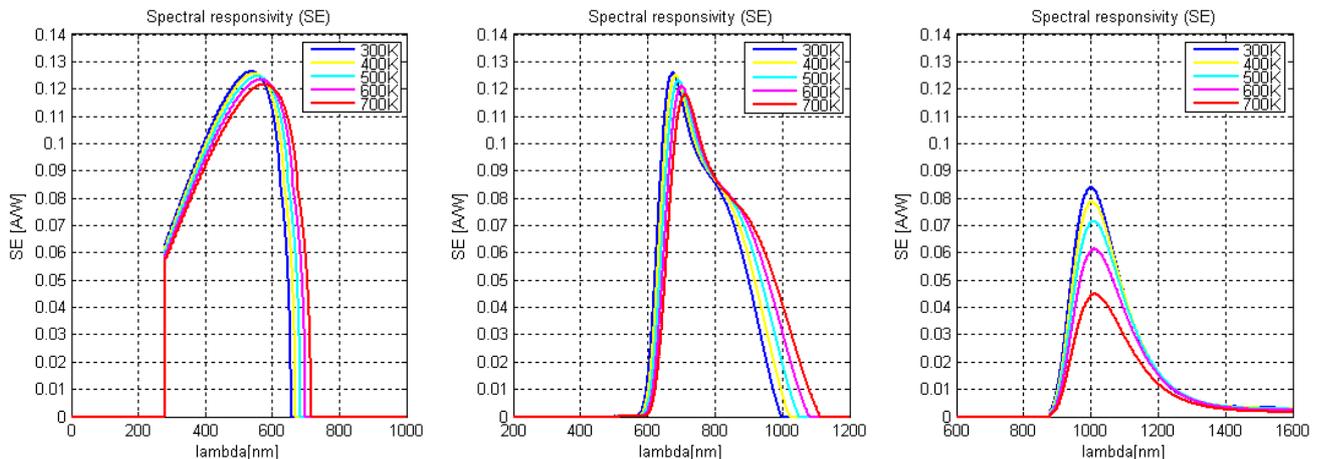


Fig. 4.1.16. Spectral Responsivity as a function of wavelength for different temperatures: InGaP (left), GaAs (center), Ge (right)

Fig. 4.1.16 shows the temperature influence on the spectral responsivity. For Fig. 4.1.15, showing the EQE the behavior is quite similar. As previously said and mathematically demonstrated, these 2 parameters are strongly related. As a consequence the electrical output is higher in the InGaP cell than in the Ge cell \rightarrow a possible improvement can be imagined for the Germanium cell.

Fig. 4.1.17 gives a global idea of the SE through direct comparison at 300K of the curves resulting for each layer. The comparison between Fig. 4.1.17 and Fig. 4.1.15 can be made and results in the strict relation between these figures, as mathematically demonstrated.

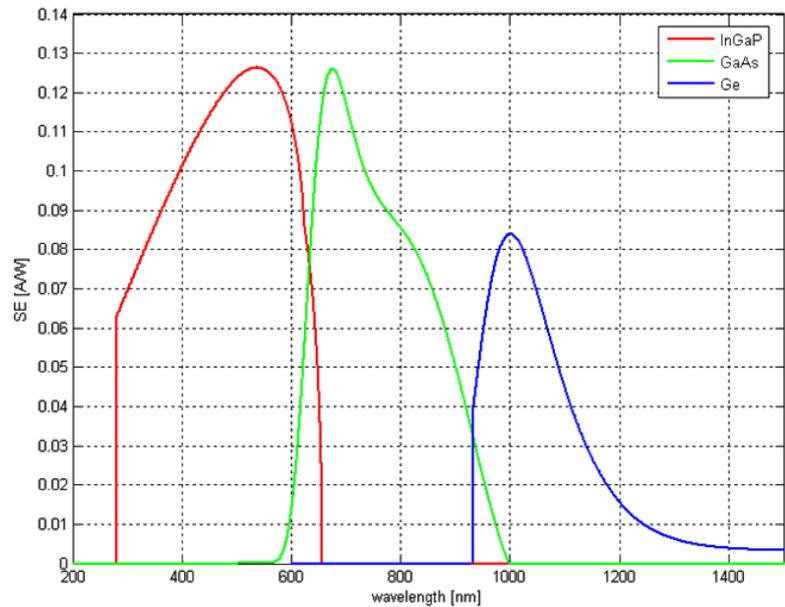


Fig. 4.1.17. Spectral responsivity of the whole device for each layer at 300K

4.2. Finite element analysis

4.2.1. Introduction

Different problems can be solved in either integral or differential form. Finite element method (FEM) is the most common method for solving problems in differential form.

There are 6 important steps in FEM:

1. Discretization – the problem domain is discretized into a collection of simple shapes, or elements.
2. Application of Boundary Conditions – solution cannot be obtained unless boundary conditions are applied. They reflect the known values for certain primary unknowns. Imposing the boundary conditions modifies the global equations
3. Develop Element Equations – developed using the physics of the problem
4. Assembly – the element equations for each element in the FEM mesh are assembled into a set of global equations that model the properties of the entire system
5. Solve for Primary Unknowns – the modified global equations are solved for the primary unknowns at the nodes
6. Calculate Derived Variables – calculated using the nodal values of the primary variables

FEM analysis of TJ solar cell structure, which is developed in the project, is performed using APSYS by Crosslight Software Inc and the following parameters and properties have been investigated:

1. band diagrams in different environment conditions (equilibrium, light illumination, voltage biasing);
2. optical power distribution for the whole structure;
3. optical generation rate;
4. external quantum efficiency;
5. I–V characteristic \Rightarrow filling factor, maximum output power, conversion efficiency.

4.2.2. Band diagrams

The band diagram in equilibrium (no light and no voltage biasing) is displayed in Fig. 4.2.1. The structure is clearly seen and it is possible to distinguish Ge (left), GaAs (center), GaInP (right) subcells and how does the bandgap vary from the top to the bottom. It is also possible to notice the particular band diagram behavior near tunnel junctions where the conduction band electrons could be aligned with the valence empty states.

Energy bandgaps for Ge, GaAs, GaInP are $0,67\text{ eV}$, $1,424\text{ eV}$ and $1,86\text{ eV}$ respectively.

Illuminating the structure by the light with a defined profile (Solar AM0 spectra) band diagram under solar irradiation can be plotted (Fig. 4.2.2). It is possible to notice the appearance of quasi-Fermi levels and the lowering of barriers induced by tunnel junctions, especially for GaInP subcell.

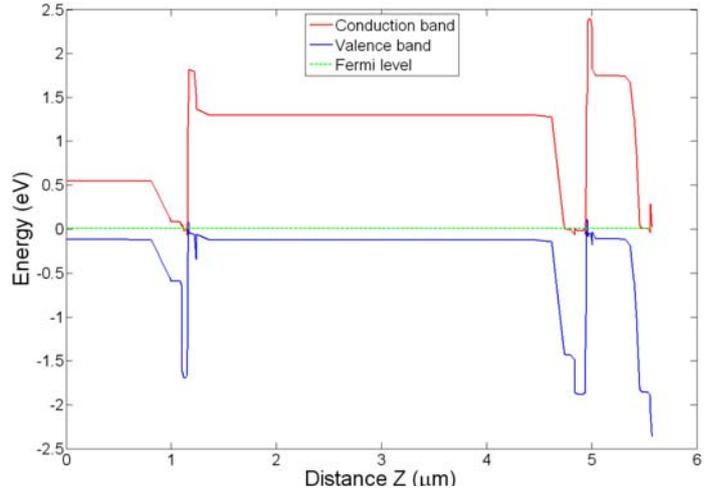


Fig. 4.2.1. Band diagram in equilibrium: Ge (left), GaAs (center), GaInP (right)

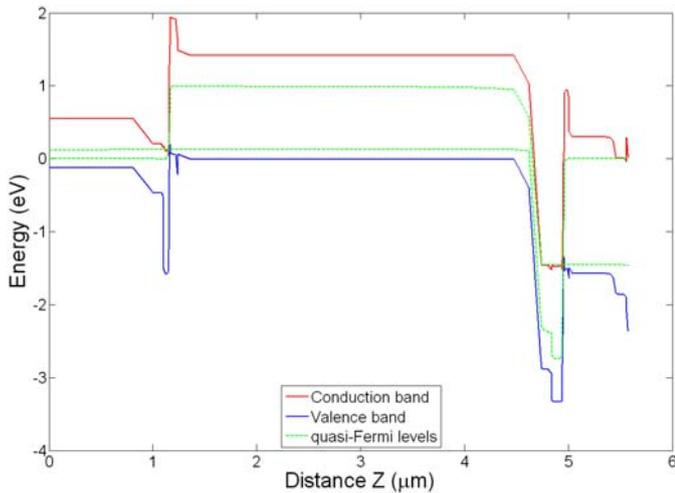


Fig. 4.2.2. Band diagram under solar irradiation

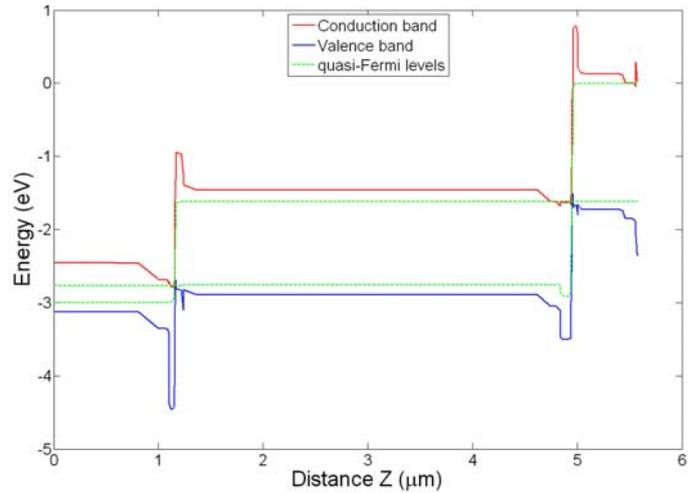


Fig. 4.2.3. Band diagram under solar irradiation and voltage biasing of 3V

The band diagram for a structure under solar irradiation and voltage biasing of 3V is plotted on Fig. 4.2.3. One important note has to be made for this case: in order to solve convergence problem with heavily doped tunnel junctions, equivalent mobility model during exchange of electrons and holes is used for these regions. This enables an efficient modeling of TJ solar cell across the whole solar spectra, where all the spectrum data points are processed by taking into account the effects of multiple layer optical interference and photon generation.

4.2.3. Optical power distribution

The optical power distribution of the structure can be analyzed by plotting relative energy density profile (W/m^2) scaled to incident light energy density, which is displayed in Fig. 4.2.4. Fig.

4.2.5 shows 3D optical power distribution for entire TJ solar cell while Fig. 4.2.6 – its 1D cross-section.

It is possible to notice the behavior of each subcell in the structure: the high energy irradiation is mainly absorbed by the wide band gap GaInP subcell. As far as Ge subcell is concerned, it is difficult to obtain correct behaviour for relative energy density in a triple-junction stack, since the low-bandgap Ge cell does not limit the current of the multi-junction stack as effectively as the other cells, even when appropriate light bias is provided. The relative energy density for the Ge subcell in Fig. 4.2.6 is a relative measurement only.

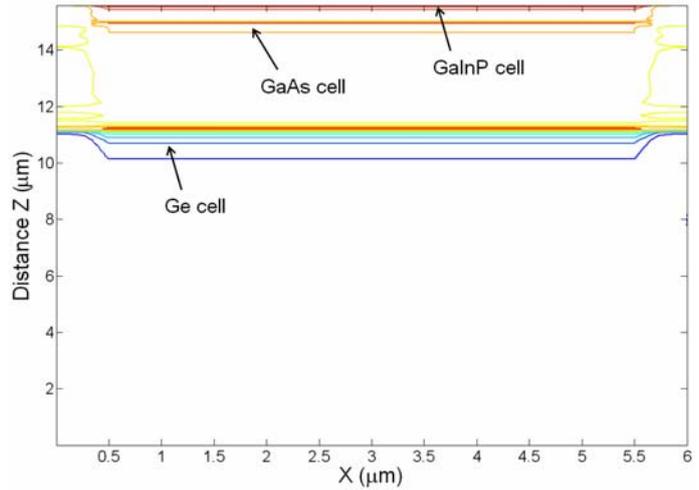


Fig. 4.2.4. Optical power distribution profile

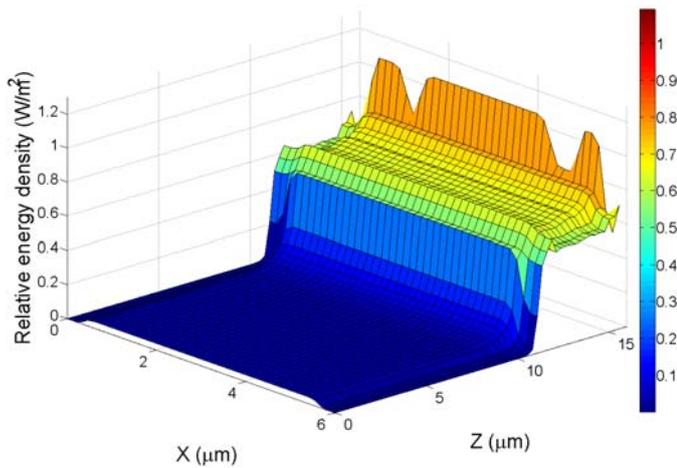


Fig. 4.2.5. Optical power distribution

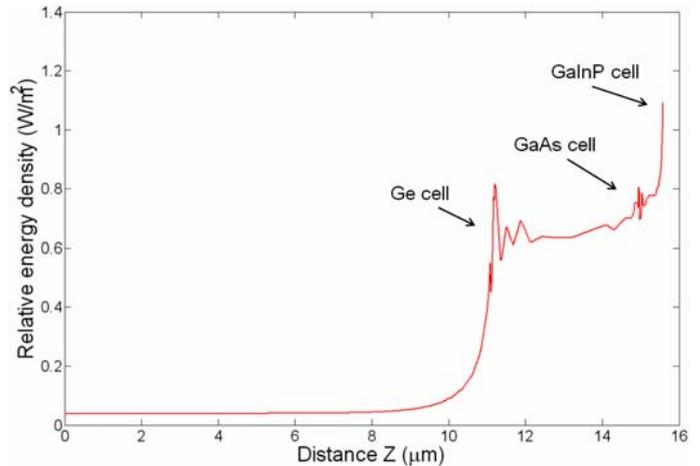


Fig. 4.2.6. Optical power distribution cross-section

Since the Ge cell has far more photogenerated current density than the GaInP and GaAs cells, the Ge cell typically does not limit the multi-junction cell current, and the absolute current density of the Ge cell is not a primary concern.

4.2.4. Optical generation rate

One of the most important phenomena, leading to the losses in solar cell structure, is radiative (direct band-to-band) recombination, which is simply the inverse of the optical generation process and is much more efficient in direct band gap semiconductors than in indirect band gap semiconductors [8]. Recombination rate is solely dependent on the minority carrier (also called the limiting carrier). This is reasonable since there are far fewer minority carriers than majority carriers and one of each is necessary for there to be recombination. Plotted in Fig. 4.2.7, optical generation rate (as well as optical power distribution in p. 4.2.3) reflects the fact, that the high energy irradiation is mainly absorbed by the wide band gap GaInP subcell.

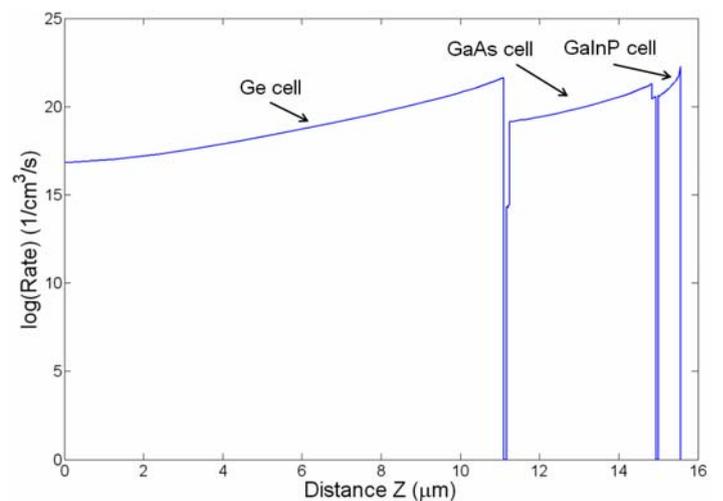


Fig. 4.2.7. Optical generation rate

4.2.5. External quantum efficiency

Theoretical description of external quantum efficiency was presented in p. 4.1.8.

The subcell efficiencies were calculated separately for each subcell by taking optical power density value (ref. p. 4.2.3) at each cell interface (this is especially necessary for overlapping wavelength regions where absorption by adjacent subcells happens). With all three subcells in stack, optical power density was calculated at each cell front interface. For the top front power density, solar spectrum data was used, but transformed into usual optical power density in W/m^2 .

For most of the region where solar light is absorbed only by one particular subcell, the power density will be 100% of the solar power density. For the overlap region, the percentage of power arriving to particular subcell front interface will be smaller than 100%. Front reflection losses were considered separately with each subcell diode

Running APSYS in series, I–V curves with short circuit current for each subcell diode at each wavelength were calculated. Finally this allowed to evaluate external quantum efficiency with the total solar power density, which is plotted in Fig. 4.2.8.

The dependence of the Ge cell QE on wavelength is very instructive, showing low response for the shorter wavelengths. This can be explained by high absorption for photon energies above the 0,67 eV gap of Ge, in the n-type Ge emitter where minority-carrier lifetime is short. It is also clearly seen that for each subcell there are particular wavelengths which form a region where photons are absorbed and the efficiency of the subcell is high.

For the TJ solar cell similar to one which is developed in the project, technically it was found that the anti-reflection coating (ARC) layer, the BSF and window layers all help to improve the quantum efficiency [9]. Introducing optical coating (MgF₂ + ZnS) spectrum files to APSYS model, the simulation indicates that better efficiency occurs with about 135 nm for ARC layer in the front. For the BSF and window layers, the simulation indicates better carrier transport across the tunnel junction with possible reduced recombination at the heterointerfaces. The layer thicknesses for each subcell could also be optimized to enhance the quantum efficiency. The emitter layer thicknesses for the TJ solar cell are all set as 0.1 μm because it is believed that a thinner emitter with thickness less than the minority-carrier diffusion length allows more photogenerated current to be collected at the contact terminals.

4.2.6. I–V characteristic

4.2.6.1. Defining I–V characteristic of a solar cell

I–V characteristic is one of the most important characteristics aimed at evaluating the performance and stability of a solar cell.

The general form of the current as a function of the voltage is given by:

$$I(V) = I_{sc}(V) - I_d(V),$$

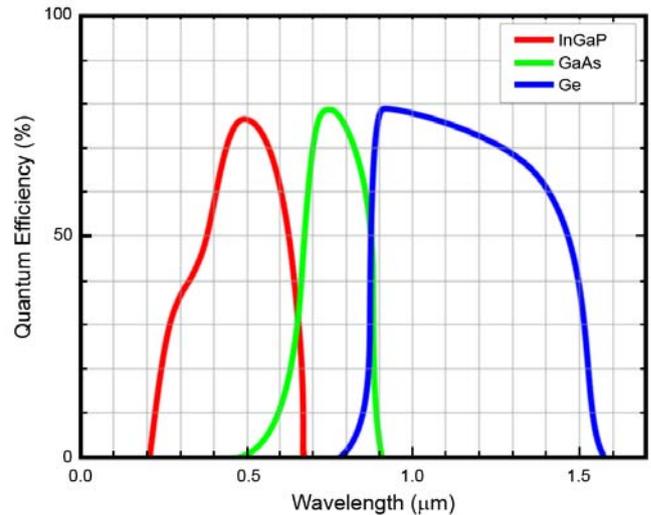


Fig. 4.2.8. Calculated external quantum efficiency

where the first term is the short circuit current and the second is the dark current. The details will be exploited further in p. 4.3, but by concept dark current is a current due to the potential difference across the load which gives contribution in opposite direction of the photon current.

To understand the importance of the I–V characteristic, the result for a typical solar cell based on single junction can be considered. Assuming fixed environment condition, a typical I–V characteristic of a solar cell can be plotted (Fig. 4.2.9). The operating point on power vs. voltage curve (P–V curve) will depend on the solar array characteristic and the load. Assuming that initially there is no load, the operating point will be at the far right at the open-circuit voltage, V_{OC} , of the solar array with zero current ($V = V_{OC}$, $I = 0$). As the load increases, the operating point will move up-left, i.e. voltage at the solar array terminal decreases, while the power increases. As the load increases further, it will reach the maximum power point (MPP), where the power drawn from the solar cell is maximized. The voltage at this point is denoted by the maximum-power voltage (V_{mp}), and the current (I_{mp}). If the load increases beyond this point, the voltage decreases and power drops. Eventually, the operating point will reach the far left at the short-circuit current I_{SC} with zero voltage output ($V = 0$, $I = I_{SC}$).

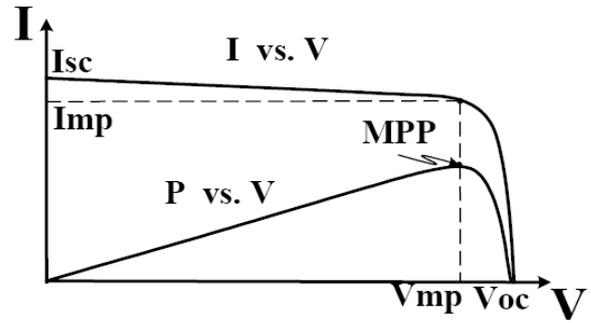


Fig. 4.2.9. Typical I-V characteristic of solar cell

4.2.6.2. Using FEM for simulation of TJ solar cell electrical behaviour

By biasing TJ solar cell with a voltage of 3V it is possible to obtain its I–V characteristic.

The simulated short-circuit total current density for GaInP/GaAs/Ge triple-junction solar cell at 300 K is presented in Fig. 4.2.10.

In order to calculate filling factor FF, the radiation intensity (or Solar Constant) of air mass zero (AM0) radiation spectrum was considered equal to $1,353 \text{ KW/m}^2$ [8].

The results correspond to experimental research [4] quite well (simulated efficiency 29,9% vs. experimental efficiency 26,7% and simulated FF 91,9% vs. experimental 85,15%). This can be explained by the fact, that during the simulation the absorption effects in all the layers except p-n junctions of subcells were neglected, equivalent mobility model for tunnel-junction regions was applied and that the anti-reflecting coating was optimized.

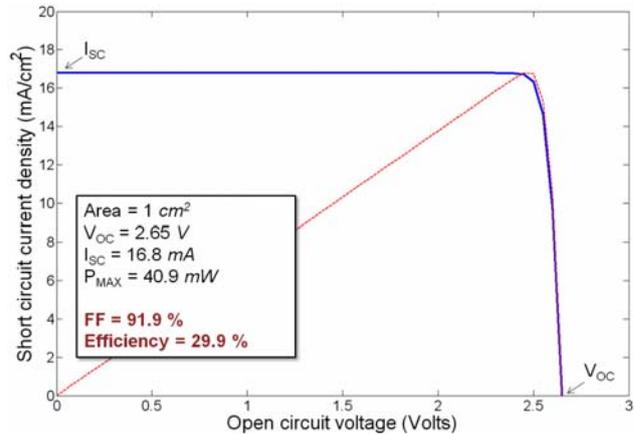


Fig. 4.2.10. I–V characteristic and electrical parameters

4.3. Electrical simulation

4.3.1. Characteristic equation

The electrical behaviour is one of the most important aspects that characterize a solar cell device and so, it is important to know what the fundamental equations are and how they are linked to the physics parameters. Moreover, the equation which characterizes the electrical behaviour, gives the possibility to build an equivalent electric circuit to easily make simulations that permit to extract some important figures of merit.

From the solution of minority-carrier equation it is possible to evaluate the minority-carrier current density equation and this is used to find the total current in a solar cell made like a p-n semiconductor junction. So the total current equation is:

$$I = I_{SC} - I_{01} \left(e^{\frac{qV}{KT}} - 1 \right) - I_{02} \left(e^{\frac{qV}{2KT}} - 1 \right),$$

where, I_{SC} is the short circuit current and I_{01}, I_{02} are respectively the dark saturation current due to recombination in the quasi-neutral region and the dark saturation current due to recombination in the space charge region.

All these three components have been computed in order to build the equivalent circuit of a three layer solar cell device which will be presented in the next paragraph. For this moment it is important to notice that the previous equation corresponds to a current generator with two diodes in parallel as shown in Fig. 4.3.1.

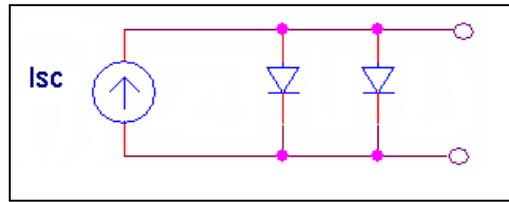


Fig. 4.3.1. Electrical circuit representation of the total current for a single junction solar cell

The constant component of the diode current is due to the dark saturation currents which are expressed by the following equations:

$$I_{01} = I_{01,p} + I_{01,n} \quad , \quad I_{02} = qA \frac{W_d n_i}{\tau_d}$$

Where, $I_{01,p}$ is due to the recombination in the p doped region, $I_{01,n}$ is due to recombination in n doped region, W_d is the depletion width and τ_d is the carrier life time in the depletion region.

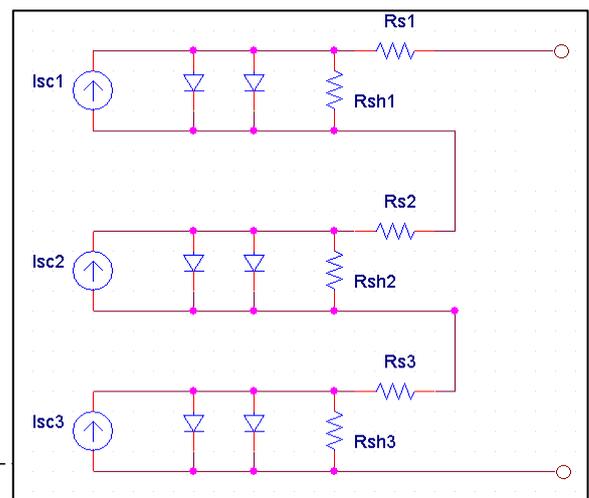
4.3.2. $I-V$ characteristic curve extraction

4.3.2.1. Equivalent electrical circuit

As said in the previous paragraph electrical characteristic is very important to well understand the behaviour of a solar cell in term of device efficiency. To do that, an equivalent circuit of the TJ solar cell was built taking in account the total current equation seen before with some added limit factor like serial resistance (R_S) and shunt resistance (R_{Sh}) which have been previously neglected.

So, the total current expression becomes:

$$I = I_{SC} - I_{01} \left(e^{\frac{q(V+IR_S)}{KT}} - 1 \right) - I_{02} \left(e^{\frac{q(V+IR_S)}{2kT}} - 1 \right) -$$



The serial and shunt resistances are parasitic effects of the device. In particular, the first one reduces the short circuit current while the second one reduces the open circuit voltage. The extraction of these parameters is explained later, but for the moment it sufficient to know how do they modify the total current equation and the electric circuit.

Fig. 4.3.2 shows the equivalent electrical circuit of TJ solar cell.

The circuit represents a two-terminal series-connection configuration, where the three current generators implement the short circuit current of each layer. The diodes in parallel to the generators are due to recombination factors inside each single layer which have been explained in the previous paragraph. The serial and shunt resistances are also added to consider the parasitic effect that limits the short circuit current and open circuit voltage.

4.3.2.2. Open circuit voltage extraction

Assuming R_{sh} to be huge, it is possible to consider of the value of R_s . In simulation with proper I_{sc} and I_0 , all different values of R_s lead to the same open circuit voltage V_{oc} (the voltage when the output current is zero).

For example, taking GaInP subcell, it is possible to get V_{oc} equal to 1,04 V. Fig. 4.3.3 shows I–V characteristics for different serial resistances.

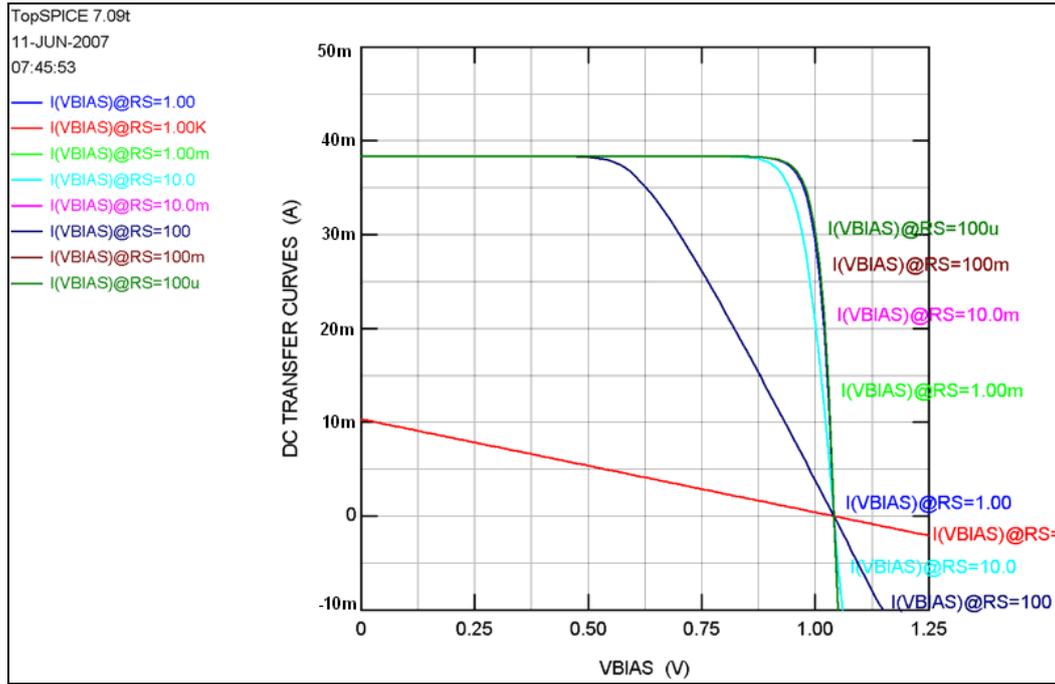


Fig. 4.3.3. I–V characteristics for different R_s

Using the same technique, V_{oc} for Ge is 0,9 V, for GaAs – 0,5535 V.

4.3.2.3. Calculation of serial and shunt resistances

The importance of R_s and R_{sh} are not the same for different values. In same case, it is possible to neglect one of these two.

Short-circuit current vs. open-circuit voltage diagram is shown in Fig. 4.3.4. In the region above the solid line, it is the area where R_{sh} is more important, and in the region below the solid line, it is the area where R_s is more important.

In the regime where only R_{sh} is important, the equation is:

$$\frac{V_{oc}}{R_{SH}} = I_{SC} - I_0 e^{qV_{oc} / A_0 KT}$$

In the regime where only series resistance R_s is important:

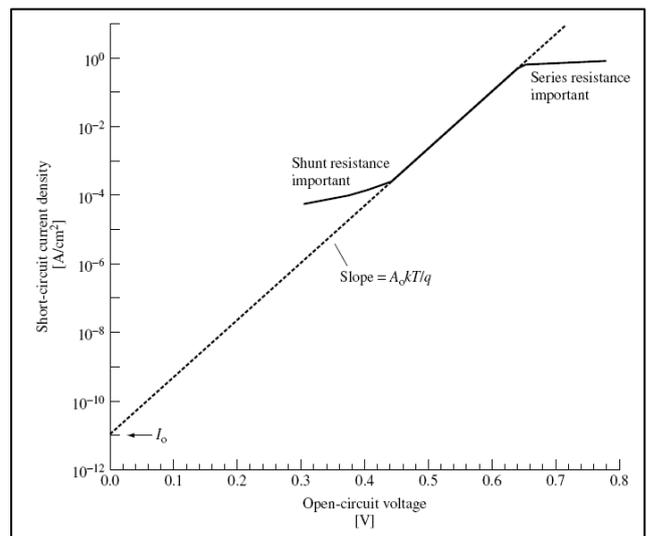


Fig. 4.3.4. Short-circuit current versus open-circuit voltage

Fig. 4.3.2. Equivalent electrical circuit of a TJ solar

$$I_{SC} R_S = \frac{A_0 K T}{q} \ln \left[\frac{I_0 e^{q V_{OC} / A_0 K T} - I_{SC}}{I_0} \right],$$

where A_0 is reality factor.

So, it is required to perform calculations and determine the region. Then R_s or R_{sh} can be calculated by the equations given.

According to Fig. 4.3.4 R_{sh} is more important for all three layers. So R_{sh} has to be calculated and R_s may be neglected. Taking into consideration that all the current parameters are in fact current densities, cells area of 1 cm^2 is assumed, so R_{sh} can be calculated for corresponding current. After performing the calculations, R_{sh} for GaInP is 1236Ω , for GaAs is 2580Ω and for Ge is 29580Ω .

4.3.2.4. Simulation results for the whole structure

From the I–V curve $I_{sc} = 16,53 \text{ mA}$ and $V_{oc} = 2,5 \text{ V}$.

Considering the power curve, the power gets maximum when $V_{bias} = 2,35 \text{ V}$, and the maximum power is $36,78 \text{ mW}$.

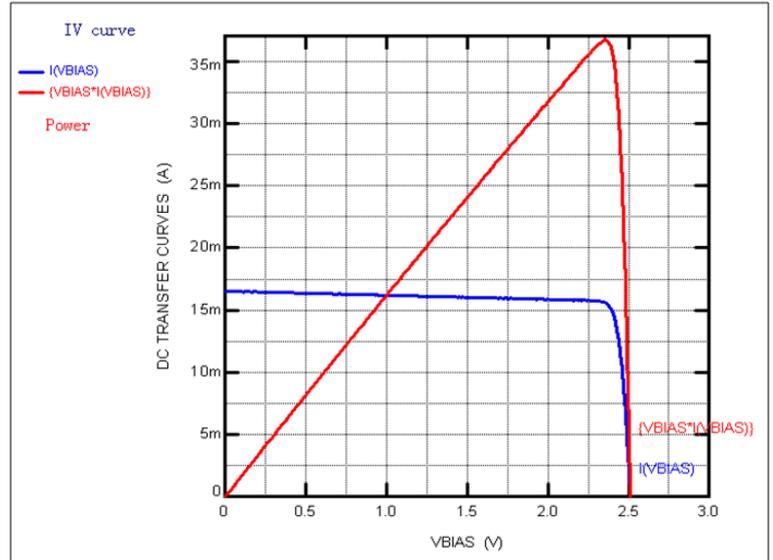


Fig. 4.3.5. I–V curve for GaInP/GaAs/Ge TJ solar cell

So, the filling factor is:

$$FF = \frac{\text{Maximum Power}}{I_{SC} \times V_{OC}} = 0.88$$

From p. 4.2.6.2 power density of incident light is $1,353 \text{ KW/m}^2$ and for the area of 1 cm^2 the power conversion efficiency is:

$$\eta = FF \cdot \frac{V_{OC} \cdot I_{SC}}{P_{in}} \cdot 100\% = \frac{0.36 \text{ W}}{0.1353 \text{ W}} \cdot 100\% = 26,88\%$$

The results correspond to experimental research [4] very well (simulated efficiency 26,88% vs. experimental efficiency 26,7% and simulated FF 88% vs. experimental 85,15%).

5. TRIPLE–JUNCTION SOLAR CELLS APPLICATIONS AND CHALLENGES

The GaInP/GaAs/Ge lattice-matched system has gained significant attention in recent years for high-efficiency solar cells in both space and terrestrial applications [4][11]. These TJ solar cells are fabricated on low-cost, high-strength, Ge substrates, making them highly compatible with large-volume manufacturing.



Fig. 5.2. Example of a concentrator solar cell device

Although multi-junction solar cells are very efficient, they are also very expensive. Due to their high cost, multi-junction solar cells are primarily used in systems in outer space and as concentrator cells where a large amount of sunlight is reflected onto the cell. The use of multi-junction solar cells made of III-V semiconductor materials appears to be restricted to limited applications while single crystalline silicon semiconductors have a wider application due to the lesser cost.

Unlike most space technologies, multi-junction solar cells, credited with helping scientists gather much more data than expected on Mars by dramatically extending the extraterrestrial lifetimes of the Spirit and Opportunity space rovers, were initially designed for earthbound applications. After proving themselves in space, the high-efficiency cells are finally becoming cost-effective for generating renewable energy back on terra firma.

More than 20 years ago, Jerry Olson of the U.S. National Renewable Energy Laboratory (NREL) and his colleague Sarah Kurtz developed a type of multi-junction cell that uses advanced materials – gallium indium phosphide GaInP and gallium arsenide GaAs – to increase energy efficiency. Olson stresses that the cells were “always envisioned as being one piece in the puzzle for terrestrial solar photovoltaics”. However, satellite manufacturers were the first industry to capitalize on the cells' potential.

Fig. 5.1 shows multi-junction solar cells setup made by Pyron Solar, Inc. The concentrator array cools its multi-junction solar cells by immersing their heat sinks in water. The approach enhances the ability of concentrators to work with high-efficiency cells. Fig. 5.2 shows another example of a concentrator cell device.

The table below summarises the past, present and anticipated future trends of high-efficiency multi-junction solar cells [10].

Table. 5.1. Key issues for realizing high-efficiency multi-junction solar cells

Key issue	Past	Present	Future
Top Cell	AlGaAs	InGaP	AllnGaP
3rd Layer	None	Ge	GaInNAs etc...



Fig. 5.1. Multi-junction solar cells by Pyron Solar, Inc.

Substrate	GaAs	Ge	Si
Tunnel Junction	DH-GaAs	DH InGaP	DH wide/narrow Eg
Lattice Matching	GaAs	In _{0,01} GaAs	Lattice mismatch
Carrier Confinement	InGaP BSF	AlInP BSF	Widegap BSF
Photon Confinement	None	None	Bragg reflector, etc.

In the 1980s, much effort was invested in the monolithic Al-GaAs/GaAs tandem solar cell, but progress was slowed by oxygen contamination of the AlGaAs. Extremely low surface recombination velocities were observed in the more oxygen tolerant InGaP material [12] and it soon became the material of choice for multi-junction solar cells, leading to a number of notable achievements using the In_{0,48}Ga_{0,52}P/GaAs tandem structure and mechanical stack designs. A study aiming to optimise the In_{0,48}Ga_{0,52}P top cell showed that the lowest surface recombination was obtained using an AlInP window layer and the longest minority lifetime obtained with a buffer layer and optimised growth temperature [13]. This resulted in a record efficiency 18,5% In_{0,48}Ga_{0,52}P solar cell.

The tunnel junction forms another important aspect of the multi-junction structure. It should be optically transparent and connect the component cells in the multi-junction structure with the minimum of electrical resistance. The optical absorption in the tunnel junction can be minimised by using thin layers of wide bandgap material, although care must be exercised as the tunnelling current decreases exponentially with increasing bandgap energy. A double heterostructure (DH) was initially proposed for AlGaAs/GaAs tandem cells with the DH layers blocking dopant diffusion [14]. Similar advantages were found when the DH tunnel junction was applied to the In_{0,48}Ga_{0,52}P/GaAs tandem solar cell. Compared with a plain InGaP tunnel junction, the DH tunnel junction with AlInP barriers achieved a peak tunnelling current of 2 A/cm^2 while the plain InGaP tunnel junction achieved a peak tunnelling current of only 5 mA/cm^2 . This improvement is due to the lower diffusion coefficient of Zn in the AlInP and InGaP materials [15]. An additional benefit of the DH tunnel junction is the provision of a back-surface-field and window layer for the adjacent p-n junctions.

By growing the In_{0,48}Ga_{0,52}P/GaAs device on a Ge substrate it is possible to create a third junction, thereby marginally increasing the voltage of the multi-junction device. A further improvement can be made by paying careful attention to the lattice parameter of the Ge substrate. It is commonly assumed that the 0,08% lattice mismatch between GaAs and Ge is negligibly small, but it is still sufficient to introduce misfit dislocations when a thick GaAs epilayer is grown. By replacing the GaAs with In_{0,01}GaAs, a fully lattice-matched cell can be made with a negligible misfit dislocation density. A further advantage of the In_{0,01}GaAs layer is a marginal increase in short-circuit current over the GaAs, on account of the lower bandgap of the In_{0,01}GaAs [16][17].

Since the Product is mainly aimed at space application, it is required to take into consideration that in the space environment there are considerable quantities of high-energy radiation, specifically protons and electrons that penetrate the solar cell and introduce defects that act as carrier traps and recombination centres [18].

As a typical satellite PV array is expected to last up to 20 years, it is important to understand the behaviour of radiation induced defects and so to design solar cells that can tolerate the space environment [19]. Owing to the series connection in the multi-junction solar cell, the radiation resistance of the cell as a whole will be dominated by the worst performing layer.

When considering the multi-junction cell as a whole, the standard means for maintaining high efficiency is to design the solar cell such that the In_{0,01}GaAs junction is current rich at the beginning of life (BOL) and becomes current matched to the In_{0,49}Ga_{0,51}P at the end of life (EOL). Nevertheless, this compromises the BOL efficiency, so it is desirable to dispense with the In_{0,01}GaAs junction and consider designing a multi-junction cell around more radiation resistant materials, such as InGaAsP [20].

6. CONCLUSION

During the project the following tasks were performed:

1. As a starting point, three generations of solar cells were considered: wafers, thin-films, and advanced thin-films, respectively. Physical principles, schematic representation, advantages and disadvantages were discussed. Finally the list of scientific laboratories and companies which do R&D projects in the field of solar cells and also solar cells manufacturers were presented.
2. Technological and physical principles of multi-junction solar cells were presented. According to recent achievements and future trends product specifications were developed.
3. Product architecture was developed. The third generation of solar cells was chosen as the basis for the Product development. Physical phenomena beyond multi-junction solar cells were investigated.
4. Overall simulation of the Product was performed: physical simulation of the device, finite element analysis, the electrical simulation and design. Different mathematical models were developed, executed and compared with experimental results obtained from theoretical analysis.
5. Prospective applications and challenges of TJ solar cells were discussed.

REFERENCES

- [1] Gavin Conibeer, Martin Green, Richard Corkish, Young Cho, Eun-Chel Cho, Chu-Wei Jiang, Thipwan Fangsuwannarak, Edwin Pink, Yidan Huang, Tom Puzzer. Silicon nanostructures for third generation photovoltaic solar cells. *Thin Solid Films*, Volumes 511-512, 26 July 2006, pp. 654-662.
- [2] Martí, N. López, E. Antolín, E. Cánovas, C. Stanley, C. Farmer, L. Cuadra, A. Luque. Novel semiconductor solar cell structures: The quantum dot intermediate band solar cell. *Thin Solid Films*, vol.511-512, 26 July 2006, pp. 638-644.
- [3] Ryne P. Raffaele, Stephanie L. Castro, Aloysius F. Hepp, Sheila G. Bailey. Quantum dot solar cells. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, vol. 10, Issue 6, September 2002, pp. 433-439.
- [4] Nasser H. Karam, Richard R. King, B. Terence Cavicchi, Dimitri D. Krut, James H. Ermer, Moran Haddad, Li Cai, David E. Joslin, Mark Takahashi, Jack W. Eldredge, Warren T. Nishikawa, David R. Lillington, Brian M. Keyes, Richard K. Ahrenkiel. Development and Characterization of High-Efficiency GaInP/GaAs/Ge Dual- and Triple-Junction Solar Cells. *IEEE Trans. Elec. Devices*, v. 46, 1999, p. 2116-2117.
- [5] Sebastian Lourduoss. "Semiconductor Optoelectronics", lecture 14.
- [6] Kurtz S et al., Proc. 1st World Conference on PV Energy Conversion, 2108 (1994).
- [7] Jenny Nelson. *The physics of the solar cells*. Imperial College Press, London, 2003.
- [8] *Handbook of Photovoltaic Science and Engineering*. Edited by Antonio Luque and Steven Hegedus. John Wiley & Sons Ltd, 2003, p. 76.
- [9] H. Kurita, T. Takamoto, E. Ikeda, M. Ohmori. High-Efficiency Monolithic InGaP/GaAs Tandem Solar Cells with Improved Top-Cell Back-Surface-Field Layers. Central Research Laboratories, Japan Energy Corporation.
- [10] T. Takamoto et al., 3rd World conference on Photovoltaic Energy conversion, May 11-18 2003 Osaka, Japan
- [11] M. Yamaguchi, T. Takamoto, A. Khan, M. Imaizumi, S. Matsuda, N. J. Ekins-Daukes. Super-high-efficiency Multi-junction Solar Cells. *Prog. Photovolt: Res. Appl.* 2005; pp. 125–132.
- [12] Olson J, Ahrenkiel R, Dunlavy D, Keyes B, Kibbler A. Ultralow recombination velocity at Ga_{0.5}In_{0.5}P/GaAs heterointerfaces. *Applied Physics Letters* 1989; 55(12): 1208–1210.
- [13] Yang M-J, Yamaguchi M, Takamoto T, Ikeda E, Kurita H, Ohmori M. Photoluminescence analysis of InGaP top cells for high-efficiency multi-junction solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells* 1997; 45: 331–339.
- [14] Sugiura H, Amano C, Yamamoto A, Yamaguchi M. Double heterostructure GaAs tunnel junction for AlGaAs/GaAs tandem solar cell. *Japan Journal of Applied Physics* 1998; 27: 269.
- [15] Takamoto T, Yamaguchi M, Ikeda E, Agui T, Kurita H, Al-Jassim M. Mechanism of Zn and Si diffusion from a highly doped tunnel junction for InGaP/GaAs tandem solar cells. *Journal of Applied Physics* 1998; 85(3): 1481.
- [16] Takamoto T. Lattice matched solar cell and method for manufacturing the same. US Patent 2001; 6,300,558.
- [17] Takamoto T, Agui T, Ikeda E, Kurita H. High efficiency InGaP/In_{0.01}Ga_{0.99}As tandem solar cells lattice matched to Ge substrates. *Solar Energy Materials and Solar Cells* 2001; 66: 511–516.
- [18] Claeys C, Simoen E. *Radiation Effects in Advanced Semiconductor Materials and Devices*. Springer-Verlag: Berlin, 2002.
- [19] Yamaguchi M. Radiation-resistant solar cells for space use. *Solar Energy Materials and Solar Cells* 2001; 68: 31–53.
- [20] Dharmarasu N, Yamaguchi M, Khan A, Yamada T, Tanabe T, Takagishi S, Takamoto T, Ohshima T, Itoh H, Imaizumi M, Matsuda S. High radiation-resistant In–GaP, InGaAsP and InGaAs solar cells for multijunction solar cells. *Applied Physics Letters* 2001; 79(15): 2399–2401.

МЕТОДЫ УСТРАНЕНИЯ ЛАТЕРАЛЬНЫХ ИСКАЖЕНИЙ, ВОЗНИКАЮЩИХ ПРИ СКАНИРОВАНИИ ЗОНДОВЫМ МИКРОСКОПОМ

Сарымсаков Р. Г.

Научный руководитель: д.т.н. проф. Шахнов В.А.
кафедра ИУ4, МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва, Россия

Аннотация

Представлен способ устранения латеральных искажений, возникающий при сканировании зондовым микроскопом (СЗМ).

Abstract

We propose a new method of lateral distortion removal caused by scanning probe microscope.

Для контролируемого перемещения иглы на сверхмалых расстояниях в СЗМ используются пьезоэлектрические двигатели. Их задача – обеспечить прецизионное механическое сканирование зондом исследуемого образца путем перемещения зонда относительно неподвижного образца или перемещения образца относительно неподвижного зонда. Работа большинства пьезоэлектрических сканеров, применяемых в современных СЗМ, основана на использовании обратного пьезоэффекта, который заключается в изменении размеров пьезоматериала под действием электрического поля. Эти пьезоэлектрические двигатели обладают нелинейностью характеристик пьезоматериала, которая приводит к тому, что объекты одинакового размера в начале и в конце сканируемого изображения будут иметь различные размеры.

На рис. 1 и 2 представлено изображение одномерной решетки с искажениями у левого края, вызванными особенностями пьезокерамики.

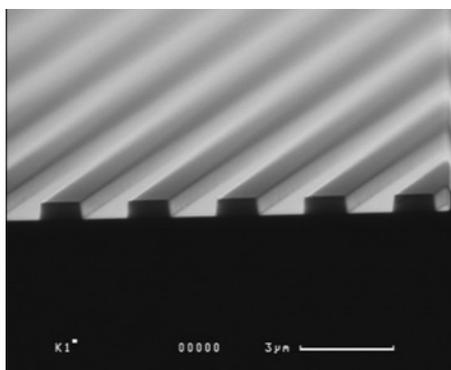


Рис. 1. СЭМ-изображение одномерной решетки [1].

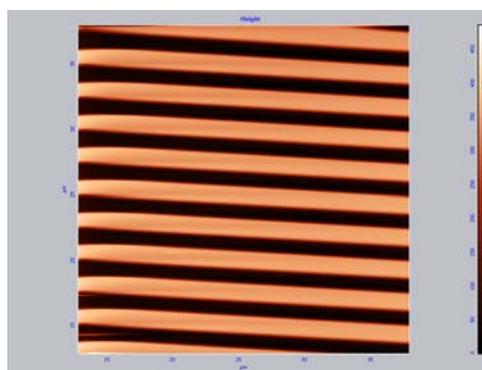


Рис. 2. АСМ-скан одномерной решетки.

Известен особый способ сканирования, который позволяет уменьшать искажения. Он включает в себя следующие технические операции [2]:

- 1) Устанавливается экспериментальный образец.
- 2) Производится сканирование всей области.
- 3) Производится распознавание особенностей рельефа и вычисление кратчайших путей между ними.
- 4) Сканирующее устройство переходит к первой особенности и сканирует её окрестность.
- 5) Сканирующее устройство переходит к следующей ближайшей особенности и сканирует её окрестность.
- 6) По пересечению этих окрестностей вычисляются локальные искажения.
- 7) Согласно этим искажениям вносятся исправления в сканы окрестностей.
- 8) Сканирующее устройство переходит к следующей особенности и сканирует её окрестность.
- 9) Если особенностей не осталось, то завершение переход к пункту 10, иначе переход к пункту 5.
- 10) Производится склейка всех сканов окрестностей всех распознанных особенностей.

Недостаток способа заключается в том, что область его применения ограничена теми моделями СЭМ, которые позволяют программно задавать произвольные перемещения сканера, и его можно применять только для рельефа с выраженными повторяющимися особенностями поверхностей.

Целью предлагаемого технического решения является повышение точности результатов сканирования на всех выпускаемых моделях СЭМ.

Для достижения указанной цели в способе сканирования идет по строкам, а эффект повышения точности сканирования является следствием обработки изображения скана, включающей коррекцию геометрии по выявленному полю искажений сканера. Поле искажений вычисляется при сравнении полученного скана кристаллической решетки или другой периодической структуры и модели с известными параметрами (периоды, углы). Для вычисления искажений можно использовать тестовые образцы двумерных решеток: высокоориентированный пиролитический графит (ВОПГ) и пилообразная периодическая структура (ППС), представленные на рис. 2 и 3.

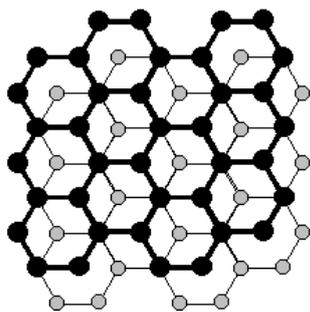


Рис. 2. ВОПГ [3].

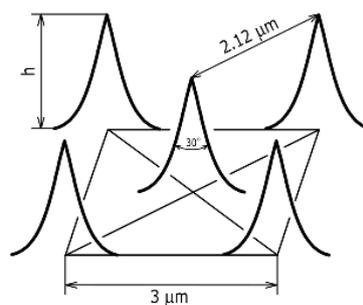


Рис. 3. ППС [1].

Параметры кристаллической решетки ВОПГ хорошо известны и вычислены с точностью до тысячных долей нанометра. Размеры ППС контролируются сканирующим электронным микроскопом (СЭМ). Микрограф ППС, полученный с помощью СЭМ, показан на рис. 3.

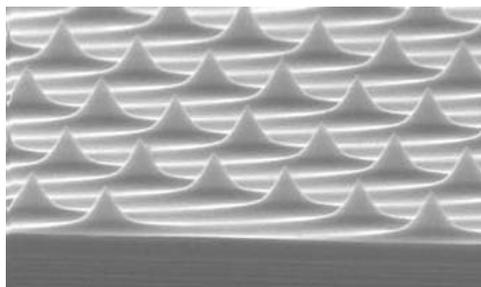


Рис. 3. Микрограф ППС [1].

Решений в области СЗМ, содержащих нахождение поля искажений сканера по распознаванию геометрии тестовых структур и коррекцию изображений по полю искажений сканера не обнаружено. Таким образом, заявляемое решение обладает существенными отличиями.

Предлагаемый способ сканирования заключается в последовательности следующих технических операций:

- 1) Устанавливается образец ППС (при микронном диапазоне) или ВОПГ (при атомарном диапазоне) с известной геометрией на сканер.
- 2) Проводится построчное сканирование в режиме АСМ.
- 3) По известным геометрическим параметрам определяется поле искажений сканера нейросетевым алгоритмом распознавания изображений.
- 4) Устанавливается экспериментальный образец.
- 5) Проводится построчное сканирование в режиме АСМ.
- 6) Полученный скан корректируется по вычисленному полю искажений сканера методом цифровой обработки изображений.

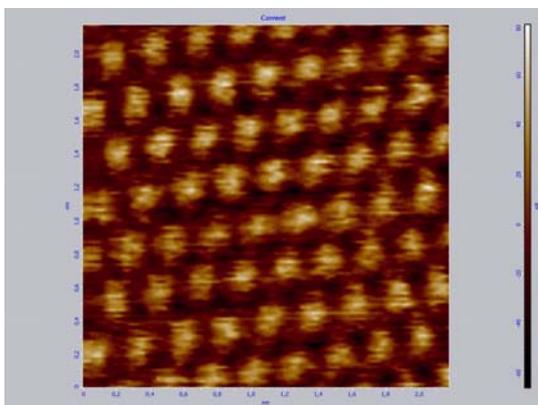


Рис. 4. АСМ-скан ВОПГ.

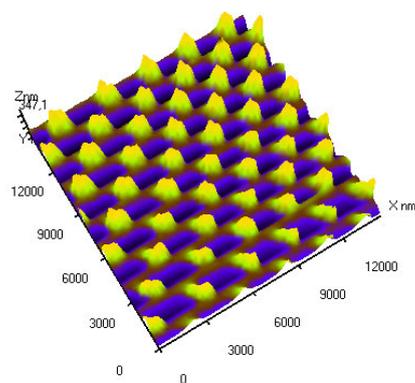


Рис. 5. АСМ-скан ППС [1].

Таким образом, распространенные структуры наподобие ВОПГ (рис. 4) можно использовать для латеральной калибровки в атомарном разрешении. ППС (рис. 5) позволит проводить анализ искажений в микронном диапазоне. Результат – экспериментальный скан повышенной точности сканирования.

Литература

1. <http://www.ntmdt.ru/>
2. Патент РФ № 2 249 264
3. <http://www.spmtips.com/products/hopg/>

НАНОКЛАСТЕРЫ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК НА ОПАЛОВЫХ МАТРИЦАХ

Норман Е.Д., Моисеев К.М.

Научный руководитель: к.т.н., доцент Булыгина Е.В.
МГТУ им.Н.Э.Баумана, Москва, РФ

Аннотация

Представлены результаты формирования автоэмиттеров на основе углеродных нанотрубок (УНТ), выращенных на опаловой матрице CVD методом. Приведена вольт-амперная характеристика и показаны перспективы использования синтетического опала для создания автоэмиттеров на основе УНТ.

Автоэмиттеры на основе углеродных нанотрубок перспективны при решении широкого класса задач, связанных, например, с разработкой таких устройств как: матричные автоэмиттеры для плоских экранов, катоды микрорадиоламп терагерцового диапазона частот, автоэмиттеры для экономичных индикаторов и осветителей, терабитных запоминающих сред и задач, связанных со считыванием информации в терабитных ПЗУ.

Актуальность использования автоэмиттеров в перечисленных устройствах обуславливается рядом их параметров: достаточно низкие рабочие напряжения при больших плотностях и значениях эмиссионного тока, устойчивость к радиационному излучению в отличие от кремниевой технологии, очень широкий рабочий температурный диапазон (они могут работать как при гелиевых, так и при довольно высоких температурах – вплоть до 3000 К). Например, обычные ЖК телевизоры не работоспособны при температурах ниже 273 К и выше 323 К.

Использование углеродных нанотрубок для изготовления автоэмиттеров представляется актуальным вследствие особых свойств первых (в частности большое aspectное отношение), относительной простоты и низкой энергоемкости производства данных устройств [1].

Химическое осаждение из газовой фазы (CVD) в настоящее время является одним из методов получения нанотрубок. Используется модель роста нанотрубок, основанная на минимизации поверхностной энергии наночастиц, предложенная Дайем (Dai). [2] На исходную поверхность с малой кривизной наносится слой Ni толщиной 10 нм. Затем полученную структуру нагревают в инертной атмосфере до 400 – 700°C. Слой катализатора деформируется во множество бляшек рис. 1.

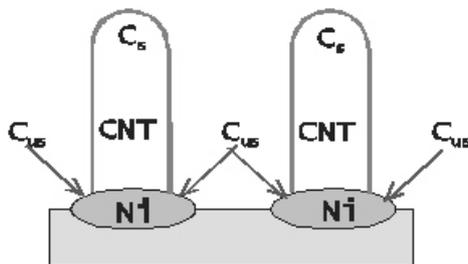


Рис. 1. Модель роста нанотрубок

Атомы углерода можно разделить на две группы. В первую группу входят атомы, которые связаны с тремя другими атомами углерода. Атом из этой группы называют атомом с насыщенными связями и обозначают как C_s . Во вторую группу входят атомы углерода, имеющие связи с другими атомами углерода, общее число которых не превышает двух. Естественно, что во вторую группу входят и одиночные атомы. Атом входящий во вторую группу называют атомом с не насыщенными связями и обозначают C_{us} . Нанотрубка растет на верхней части бляшки, а атомы C_{us} , возникают по периферии верхней части бляшки (рис. 1) [3].

Интерес к опаловым матрицам с тонкопленочными покрытиями с автоэммитерами на основе УНТ вызван особенностью структуры поверхности опала. Синтетический опал представляет собой плотноупакованные наносферы диоксида кремния (SiO_2) с диаметром 300 нм, образующие трехмерную решетку – опаловую матрицу (рис. 2). Такая структура дает основание полагать, что рост УНТ будет происходить упорядоченно в соответствии с топологией поверхности опала. Более того, наносферы могут способствовать увеличению тока автоэмиссии вследствие увеличения отношения длины к диаметру автоэммитера.

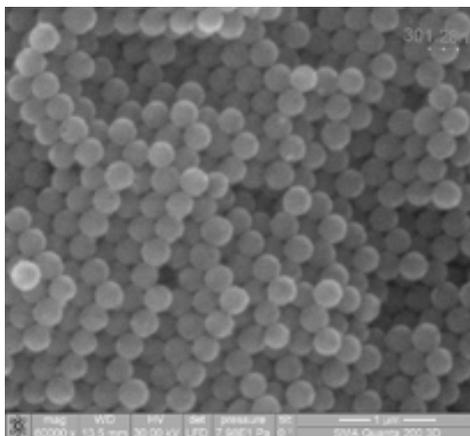


Рис. 2. Рельеф поверхности опаловой матрицы, полученный на СЭМ FEI Quanta 200 3D

Металлические пленки наносились методом термического испарения в вакууме, углеродные нанотрубки формировались CVD-методом (рис.3).

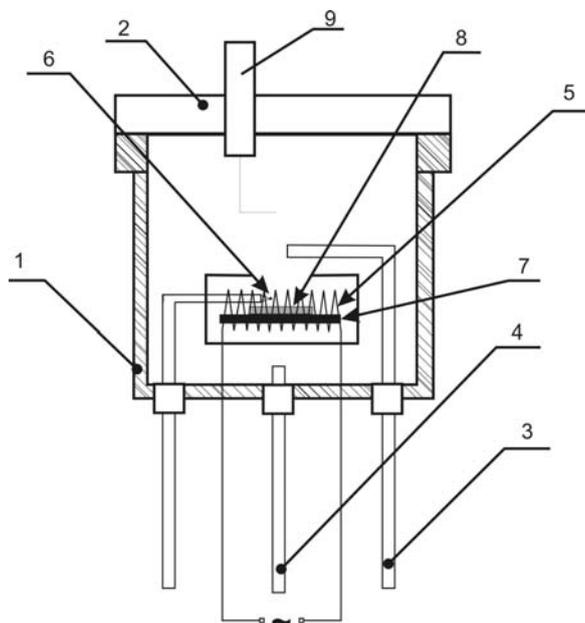


Рис. 3 Схема рабочей камеры: 1 – корпус; 2 – крышка; 3 – трубка подачи газовой смеси; 4 – трубка откачки; 5 – нагреватель; 6 – термопара; 7 – столик; 8 – образец; 9 – электрод

В эксперименте использовались режимы и технология, которые отработаны на установке и с наибольшей вероятностью дают положительные результаты. Была подготовлена подложка, где в качестве буферного слоя и катализатора выбраны подслои хрома толщиной 20 нм и пленка никеля толщиной 10 нм соответственно. Перед осаждением пленок оснастка подверглась химической очистке.

В качестве рабочего углеродсодержащего газа использовался спиртовой пар. Он получался при пропускании через этиловый спирт смеси $\text{Ar} + \text{H}_2$ (5%), а затем эта смесь подавалась в рабочую камеру. Изображение поверхности образцов опаловой матрицы с УНТ

(рис.4) получено на сканирующем электронном микроскопе FEI Quanta 200 3D. На скане отчетливо прослеживается рельеф опаловой матрицы с волокнами УНТ.

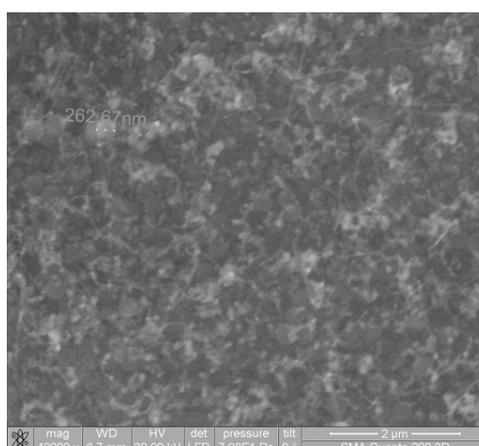


Рис. 4 Опаловые матрицы с УНТ

Для измерения плотности автоэмиссионного тока и его деградации во времени использовался эмиссионный стенд. Он создан на основе вакуумной системы напылительной установки с интегрированной в эту систему рабочей камерой от источника ионной очистки. В данной системе рабочий объем камеры откачивается до давления 10^{-4} Па, при полном отсутствии в камере паров масла. Ограничения по верхнему порогу эмиссионных токов ~ до 200 мкА при линейном размере эмитируемой области ~1 мм. На рисунке 5 представлена вольт-амперная характеристика (ВАХ), снятая с полученного образца.

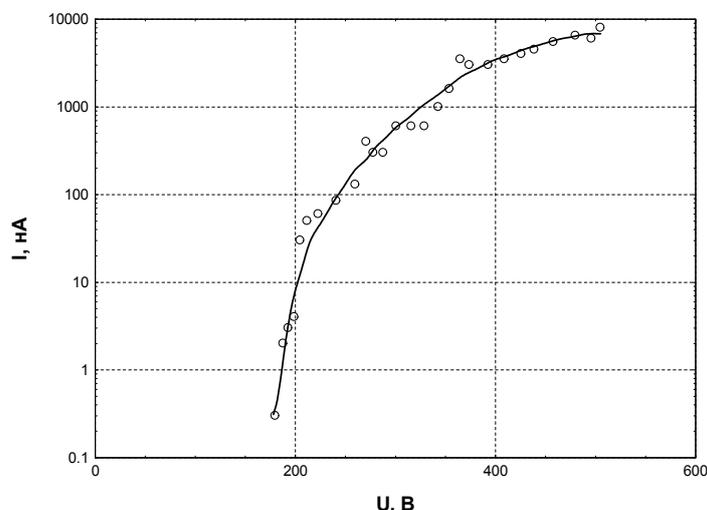


Рис. 5 ВАХ автоэмиссии из УНТ, выращенных на опаловой матрице

Результаты представлены двумя оценками:

1. Ток и напряжение эмиссии;
2. Деградация автоэмиссионных токов в течение времени.

Критериями оценки значения эмиссии выбраны параметры:

$U_{\text{порог}}$ – пороговое напряжение, при котором появляется автоэмиссионный ток, на 1 мкм межэлектродного расстояния, В/мкм.

$I_{\text{макс}}$ – максимальный ток, протекающий через диафрагму 2 мм^2 , мкА/мм².

$I_{\text{сред}}$ – средний установившийся ток, протекающий через диафрагму 2 мм^2 , мкА/мм².

Механизм деградации обусловлен действием пандеромоторных сил и связанных с ними больших механических напряжений в области соединения нанотрубки с катализатором.

Данный образец также исследовался на предмет деградации автоэмиссионного тока во времени. Критериями оценки значения деградации выбраны параметры:

U – напряжение, подаваемое на образец, В.

I – значения тока автоэмиссии до и после включения напряжения U, мкА.

Δt – время действия напряжения U, мин.

Результаты деградации тока представлены в таблице 1.

Таблица 1

U, В	I, мкА (до)	Δt , мин	I, мкА (после)
495	2,5 - 5	30	0,5 - 0,7

На основе проведенных экспериментов можно сделать вывод, что использование опаловой матрицы в качестве подложки для автоэммиттера на основе углеродных нанотрубок перспективно при низких температурах, так как специфическая поверхность опаловой матрицы вносит механические напряжения в пленку катализатора, которые снижают температуру необходимую для распада наноразмерной пленки на капли.

Полученные автоэмиссионные измерения показали низкие пороговые значения эмиссии (3 В/мкм) и высокие токи (8 мкА/мм²), что является важным при применений автоэммиттеров.

Наличие УНТ показало исследование поверхности на сканирующем электронном микроскопе. Поверхность очень плотно насыщена УНТ. При дальнейшем усовершенствовании технологии создания УНТ на опаловых матрицах она составит конкуренцию традиционным кремниевым подложкам.

Литература

1. Брич М.А., Красовская Л.И., Кушель Д.И. Молекулярно-динамическое моделирование углеродных наноструктур и их взаимодействия с компонентами углеродной плазмы / В сб. Углеродные наночастицы в конденсированных средах. Ин-т тепло- и массообмена им. А.В.Лыкова НАН Беларуси, Минск, 2006, С.55 - 62.
2. Springer Handbook Of Nanotechnology. Ed. Bharat Bhushan. 2004. pp 39-86.
3. С.А. Гаврилов, Э.А. Ильичев, А.И. Козлитин и др. Письма в ЖТФ. 2004. Том 30. Вып. 11. Стр. 48-53.

МЕТОДЫ АНАЛИЗА ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ НА ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНИЕВОЙ ПЛАСТИНЫ

Родионов И.А.

Научный руководитель: доцент, кандидат технических наук Макарчук В.В.

Россия, Москва, МГТУ им. Н.Э.Баумана, кафедра ИУ4

Аннотация

В данной работе рассмотрены основные стадии нанесения пленки резиста центрифугированием и его последующей сушки. Проведен анализ распределения температурных полей по кремневой пластине при проведении операций термообработки. Распределения температурных полей по пластине были получены при различных режимах работы установок нанесения фоторезиста. Представлены временные зависимости динамики нагрева и остывания пластин.

Abstract

The main stages of the masking process and its further baking were considered. The analysis of the temperature field distribution on the silicon wafer was carried out on thermal treatment stages. The temperature field distribution on the silicon wafer had been measured in several different cases of the masking process. The chuck and cool time dependences of the silicon wafer were received.

Введение

Равномерность распределения температурного поля по пластине при сушке определяет в определенной мере однородность параметров получаемого слоя резиста. Процесс сушки снимает напряжения в получаемой пленке резиста, которые возникают в процессе центрифугирования. Процесс нанесения резиста на центрифуге технологически можно разделить на четыре этапа.

1. Запуск центрифуги на скорости, которая обеспечивает «нормальную» подачу резиста на пластину. Под «нормальной» подачей следует понимать такую, при которой резист, попадая на пластину, не разбрызгивается и его растекание от места подачи к краям происходит равномерно. Данная скорость определяется экспериментально и сохраняется до момента прекращения подачи резиста. Отрезок времени, за который необходимая доза резиста подается на пластину, определяется давлением подачи и количеством. Давление в насосах задается программно.
2. Изменение скорости центрифуги до значения, при котором достигается требуемая толщина резиста. На данном этапе происходит растекание резиста под действием центробежных сил. Варьируя скорость вращения центрифуги, можно добиться различной толщины резиста. Зависимости толщины пленки резиста от скорости центрифуги получают экспериментально для конкретного резиста и условий нанесения.
3. Понижение скорости центрифуги в 2-3 раза для подсушки резиста. Чтобы перенести пластину с центрифуги на горячую плиту, необходимо подсушить резист для исключения возможных изменений толщины резиста, появления неплоскостности по пластине и т.п. На данном этапе скорость центрифуги снижается довольно существенно, на пленку резиста действуют меньшие центробежные силы – изменения толщины резиста не происходит.
4. Увеличение скорости центрифуги для более интенсивной подсушки резиста. Скорость центрифуги не должна превышать скорости на 2 этапе, для исключения возможного изменения толщины пленки резиста.

Для окончательной сушки и удаления излишков растворителя из резиста необходима термообработка – сушка. Как уже было отмечено выше, в процессе центрифугирования на пленку действуют растягивающие центробежные силы, которые создают внутренние напряжения, которые частично нивелируются благодаря сушке. В связи с этим становится важным обеспечить равномерную по всей поверхности пластины термообработку.

Неравномерность термообработки повлечет за собой значительный разброс параметров СБИС, расположенных в различных частях пластины.

Исследования проводились с целью оценки распределения температурного поля по кремневой пластине при сушке резиста непосредственно после нанесения на центрифугах установок SITE CBC и TRATRIX при изготовлении СБИС.

Исследуемые установки нанесения резиста и образцы

На исследуемой технологической линейке используются два типа установок нанесения резиста: TRATRIX и SITE CBC фирмы SITE. TRATRIX является обновленной версией установки SITE CBC и обладает более стабильными параметрами, которые достигаются аппаратными и программными средствами. Установка в минимально стандартной комплектации поставляется с центрифугой, горячей и холодной плитами, механической автоматической транспортной системой (подробнее об установках нанесения резиста см. [1]). На рисунке 1 показаны горячая и холодная плиты установок SITE CBC(слева) и TRATRIX (справа).



Рис. 1. Горячая и холодная плиты установок SITE CBC и TRATRIX

Внутри «горячей» плиты находится нагреватель. Кремниевая пластина помещается на ее поверхность и накрывается крышкой, с помощью которой улучшается температурная стабилизация ее поверхности. Чтобы обеспечить чистоту поверхности пластины в процессе формирования слоя резиста внутри установки создается восходящий ламинарный поток чистого сухого воздуха. Однако его наличие является одной из причин неравномерного распределения температуры по поверхности кремниевой пластины – происходит ускоренное остывание краев пластины. Поэтому в конструкции установки предусмотрены накрывающие плиты. В установке TRATRIX размер крышки больше размера плиты. Поэтому при ее закрытии крышка перекрывает плиту с установленным внутри нее нагревателем, обеспечивая, тем самым, более равномерное распределение температуры по поверхности кремниевой пластины.

Для проведения эксперимента была подготовлена кремниевая пластина диаметром 150 мм, имеющая стандартную толщину, с пятью термопарами, установленными по ее диаметру (рис. 2).

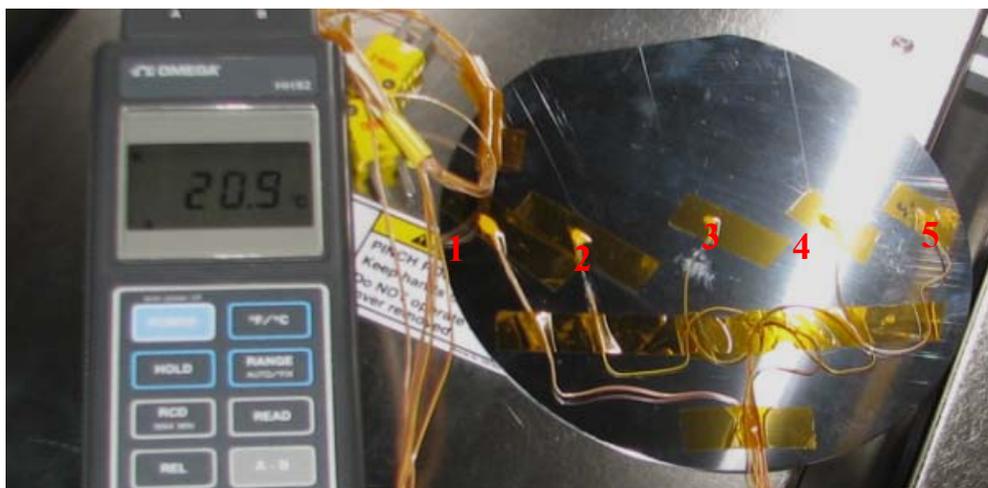


Рис. 2. Экспериментальная кремневая пластина

Измерения температуры проводились с помощью цифрового термометра HH82 фирмы «Omega», который имеет погрешность измерения температуры $\pm 0.1^{\circ}\text{C}$ и позволяет либо непосредственно измерять значение температуры по одному каналу, либо разность температуры по двум каналам. На рисунке 3 цифрами показано расположение термопар на пластине в процессе выполнения эксперимента.

В первом эксперименте измерения температуры проводились при поднятой термостабилизирующей крышке. Для получения более точной и полной картины распределения температуры показания с датчиков были сняты для двух положений пластины, в которых датчики располагаются на плите «на крест» (рис. 3)

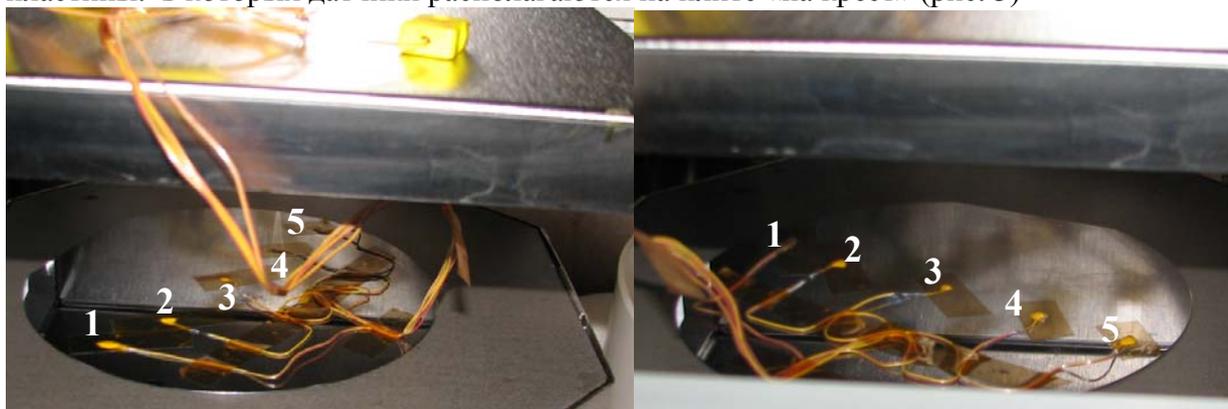


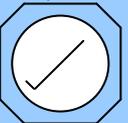
Рис. 3. Положения пластины на горячей плите

Необходимо отметить, что из-за наличия проводов, обеспечивающих связь термопар с цифровым термометром, пластина в процессе эксперимента устанавливалась на плиту вручную с помощью пинцета, в то время как в штатном режиме работы установки пластины на плиту устанавливаются автоматической транспортной системой.

Анализ температурных полей

Эксперимент проводился при температуре «горячей» плиты $+90^{\circ}\text{C}$. Данная температура соответствует типовому режиму сушки резиста в процессе производства интегральных микросхем. Температура «горячей» плиты стабилизировалась вмонтированными в нее нагревателями. Холодной плиты – водяным охлаждением ($T_{\text{воды}} = 20^{\circ}\text{C}$). Результаты измерения температуры поверхности пластины для установок TRATRIX и SITE CBC при поднятой термостабилизирующей крышке приведены в таблице 1.

Таблица 1. Распределение температур по пластине при поднятой крышке

Номер термопары	SITE CBC		TRATRIX	
	T, °C 	T, °C 	T, °C 	T, °C 
1	87,5	88,2	85,6	87,0
2	88,9	88,7	86,8	88,8
3	89,1	88,9	88,8	88,5
4	89,3	89	88,7	87
5	88,3	87,7	87,5	86,3

Ключом на схеме размещения пластин на плите показано расположение первой термопары. Наблюдаемые колебания температуры при открытой крышке составили $\pm 0,2^\circ\text{C}$. Падение температуры на краях связано с охлаждением, вызванным потоком воздуха, который создается внутри трека. На рисунке 4 показано распределение температуры по поверхности пластины для установок SITE CBC (слева) и TRATRIX (справа) при поднятой крышке (центр пластины соответствует центру прямоугольника).

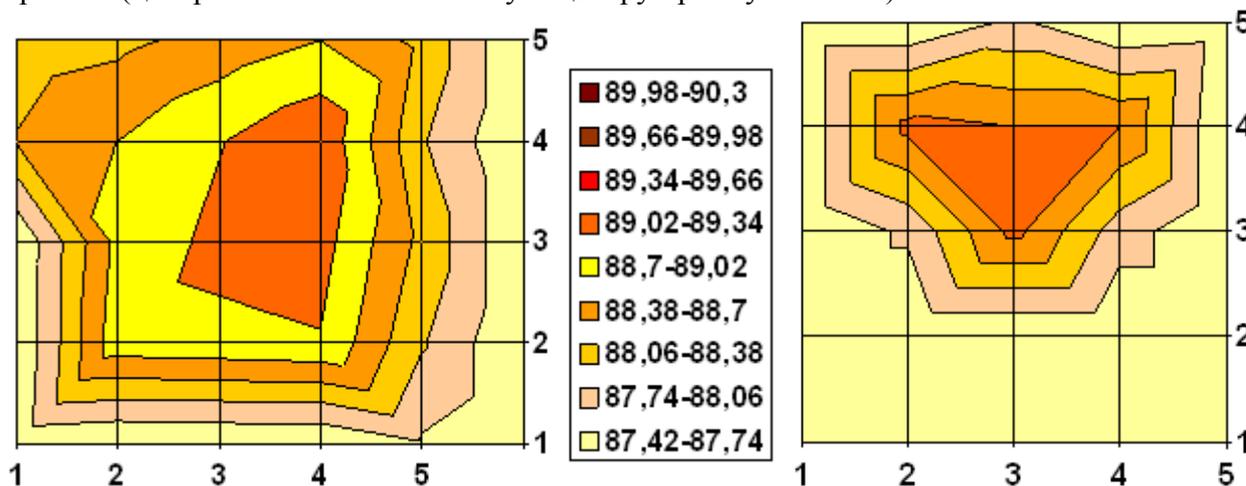


Рис. 4. Распределение температурных полей по пластине при поднятой крышке

Как видно из рисунка, на более новой установке TRATRIX, неравномерность распределения температуры по пластине при поднятой крышке выражена более резко, особенно по краям. Однако ее конструкция предусматривает верхнюю крышку с перекрытием нижней плиты и более совершенную систему обеспечения ламинарного воздушного потока внутри установки, поэтому при открытой крышке и нет необходимости стабилизировать температуру по пластине. После опускания термостабилизационной крышки в зоне пластины создается равномерное температурное поле, а при работе используется именно такой режим. Измерения температурного поля по пластине при закрытой крышке проводились на установке SITE CBC (рис. 5).



Рис. 5. Установка SITE CBC в положении с опущенной крышкой

Так как установка TRATRIX обеспечивает плотное перекрытие крышки с плитой, то при помощи имеющегося образца пластины подобные измерения провести не удалось. Термопары подключаются к цифровому термометру при помощи проводов, которые могли быть повреждены при закрытии крышки при температуре 90°C. Полученные распределения температур для установки SITE CBC, при опущенной термостабилизирующей крышке, приведены в таблице 2.

Таблица 2. Распределение температур по пластине при опущенной крышке

Номер термопары	SITE CBC	
	T, °C 	T, °C 
1	89,2	89,3
2	90	90
3	90,3	90,3
4	90	90,1
5	89,4	89,2

Не трудно заметить, что опускание термостабилизирующей крышки существенно выравнивает температурное поле по пластине (рис. 6).

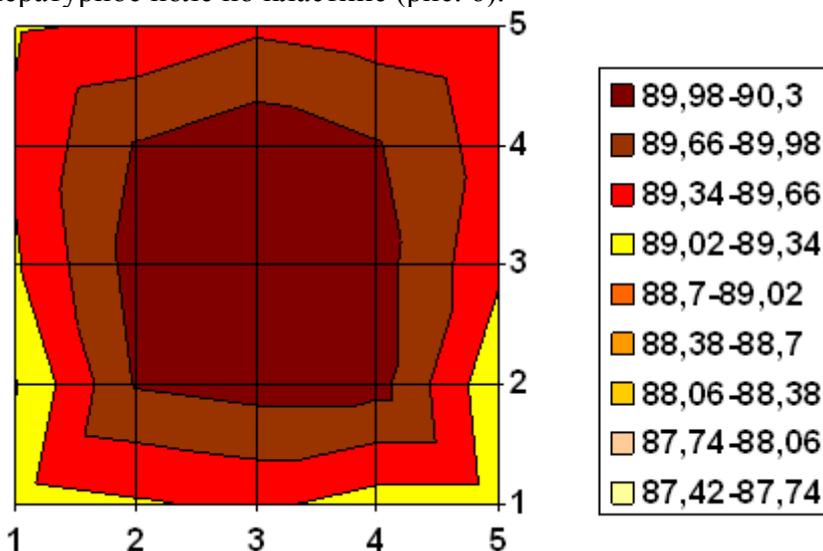


Рис. 6. Распределение температурного поля по пластине при опущенной крышке

Кроме того, опускание крышки обеспечивает повышение точности поддержания температуры пластины. Если при открытой крышке значения на цифровом термометре колебались с точностью $\pm 0,2^{\circ}\text{C}$, то после ее опускания, используя имеющееся измерительное оборудование, колебаний температуры засечь не удалось. Это позволяет сделать вывод, что колебания температуры составляли менее $0,1^{\circ}\text{C}$. Несмотря на термостабилизацию, края пластины в случае трека SITE CBC все же имеют стационарное температурное отклонение, достигающее $0,8^{\circ}\text{C}$.

Анализ динамики нагрева/остывания пластин

Равномерное распределение температуры по пластине в процессе ее остывания важно для получения однородной термической обработки по всей площади. Однако при моделировании процесса сушки резиста также важно иметь представление о динамике процесса. С целью получения дополнительных данных для построения более точной модели процесса сушки была снята зависимость температуры в центре пластины (3-я термопара) от времени.

На протяжении всего производственного цикла пластины располагаются в SMIF-контейнерах, в которых они изолированы от внешней среды. На установку пластины также поступают в SMIF-контейнере, он устанавливается в загрузчик и пластины на лифтах подаются в рабочую зону установки. В SMIF-контейнере имеются пластиковые подставки для пластин, чтобы они не плавилась, после сушки резиста пластины охлаждаются на холодной плите. В результате пластина, поступающая из SMIF-а сначала подается на центрифугу, далее сушится при $T = 90^{\circ}\text{C}$ и перед установкой обратно в контейнер охлаждается при $T = 20^{\circ}\text{C}$. Временная зависимость нагрева центральной точки кремневой пластины представлена на рисунке 7.

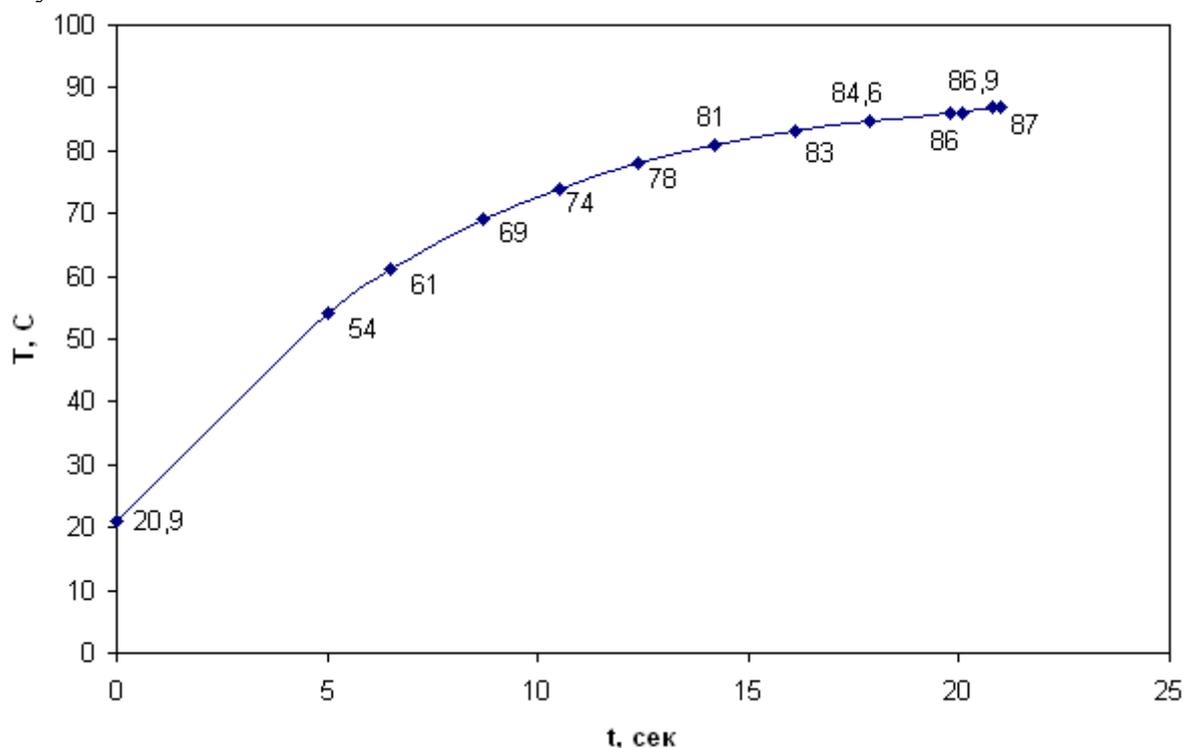


Рис. 7. Временная зависимость нагрева центральной точки (термопара №3)

Временная зависимость охлаждения центральной точки кремневой пластины представлена на рисунке 8.

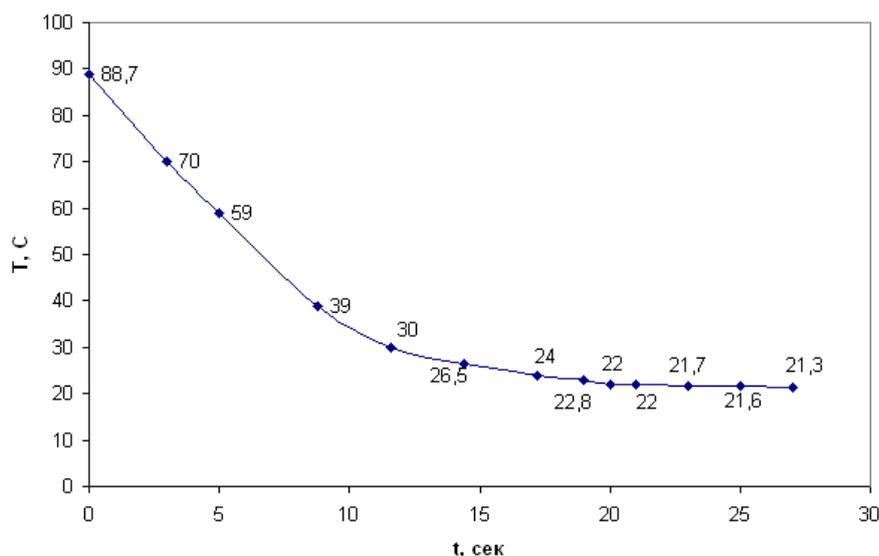


Рис. 8. Временная зависимость охлаждения центральной точки (термопара №3)

Термическое воздействие, которому подвергается кремневая пластина в процессе сушки после нанесения резиста на центрифуге, представлено графиком (рис. 9).

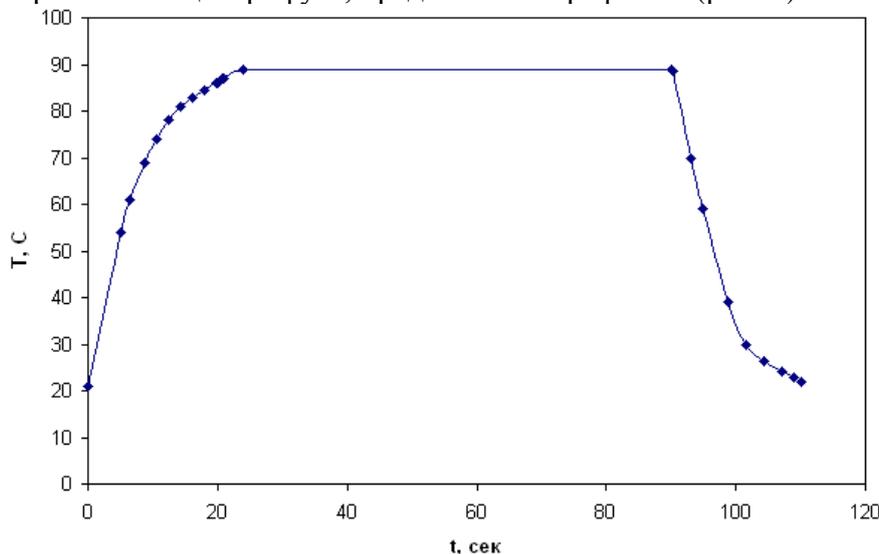


Рис. 9. Изменение температуры пластины в процессе сушки (термопара №3)

Полученная временная зависимость будет использоваться при моделировании процесса литографии и оптимизации термообработки резиста. Так как все постэкспозиционные термические обработки пластин проводятся с использованием тех же установок, то следует предположить, что температурные зависимости будут носить тот же характер. Таким образом, данным экспериментом были установлены временные зависимости и распределения температурных полей целого класса термических обработок пластин, используемых в процессах получения пленки резиста и улучшения ее свойств, связанных со стойкостью и селективностью последующего травления.

Литература

1. Родионов И.А. Анализ динамики развития современного оборудования проекционной литографии // 8-ая Молодежная научно-техническая конференция «Научно-технологические и интеллектуальные системы 2007». 18-20 апреля 2007 г. – М.: издательство МГТУ им. Н.Э.Баумана, 2007, с. 127-135.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЛИТОГРАФИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФИГУР КОРРЕКЦИИ ЭФФЕКТА БЛИЗОСТИ С ЦЕЛЬЮ МИНИМИЗАЦИИ НЕГАТИВНЫХ ПОСЛЕДСТВИЙ ЭКСПОНИРОВАНИЯ

Родионов И.А.

Научный руководитель: доцент, кандидат технических наук Макачук В.В.

Россия, Москва, МГТУ им. Н.Э.Баумана, кафедра ИУ4

Аннотация

В работе рассмотрены некоторые типы фигур коррекции оптического эффекта близости. Проведено моделирование процесса литографии с использованием рассмотренных фигур с целью минимизации негативных последствий эффекта близости. Результаты моделирования подтверждены экспериментом.

Abstract

The different types of optical proximity correction figures were considered in this work. In order to minimize the negative consequences of optical proximity effect the modeling of lithography process with OPC figures was carried out. The result of modeling was confirmed by experiment.

Введение

В настоящее время одно из направлений совершенствования технологии производства КМОП СБИС связано с сокращением размеров основного элемента таких микросхем - затвора полевого транзистора, поскольку именно уменьшение его ширины позволяет повысить тактовую частоту и, следовательно, производительность цифровых СБИС. Необходимо отметить, что это далеко не единственный параметр, повышающий характеристики современных СБИС.

Как известно, возможность уменьшения ширины затвора обусловлена в основном повышением разрешающей способности R процесса проекционной литографии, которая определяется хорошо известным критерием Релея:

$$R = K \cdot \lambda / (NA),$$

где λ – длина волны экспонирующего излучения, NA – числовая апертура объектива проекционной оптической системы, и K – коэффициент, зависящий от уровня технологии, учитывающий, к примеру, используемые методы повышения разрешающей способности литографического процесса (resolution enhancement techniques, RET's), такие как применение фазосдвигающих шаблонов, вариация формой и конфигурацией источника освещения, OPC и двойное впечатывание. Значение числовой апертуры NA зависит от качества применяемой оптической системы и наличия или отсутствия использования иммерсионных жидкостей. Помимо этого значение технологического фактора зависит от воспроизводимой топологии, ее конфигурации и регулярности. Современный уровень развития литографического оборудования, используемого при производстве КМОП СБИС, позволяет получать структуры с минимальными размерами элементов 45 нм при длине волны экспонирующего излучения 193 нм, что соответствует $\frac{1}{4} \lambda$. Еще несколько лет назад пределом проекционной литографии считалось значение равное $\frac{1}{2} \lambda$ при условии использования RET's.

Все вышеперечисленные способы повышения разрешающей способности литографического процесса кроме методик OPC и двойного впечатывания требуют капитальных вложений в оборудование, что не всегда бывает возможным.

В данной работе были поставлены следующие задачи:

1. исследования влияния различных типов фигур OPC на параметры тестовых структур с целью повышения разрешающей способности литографического процесса;
2. определение оптимальных размеров фигур коррекции различных типов, позволяющих в максимальной степени компенсировать эффект оптической близости.

Для выполнения поставленных задач были разработаны соответствующие тестовые структуры, предложена методика оценки эффективности введения фигур коррекции и ускоренная методика проведения измерений.

Методика проведения экспериментов

С целью оценки эффективности введения ОРС-фигур был спроектирован шаблон с набором тестовых структур различных типов (рис. 1), линейные размеры которых измерялись на сканирующем электронном микроскопе (scanning electronic microscope, SEM) после операции травления.



Рис. 1. Типы ОРС фигур (слева направо: bias, assist line, serif)

В качестве критерия эффективности введения фигур коррекции типа «serif» была выбрана величина сокращения длины проводника со стороны «свободного» края (рис. 2), поскольку именно этот параметр является критичным в реальных СБИС при задании нормы на вылет затвора транзистора за границу активной области.

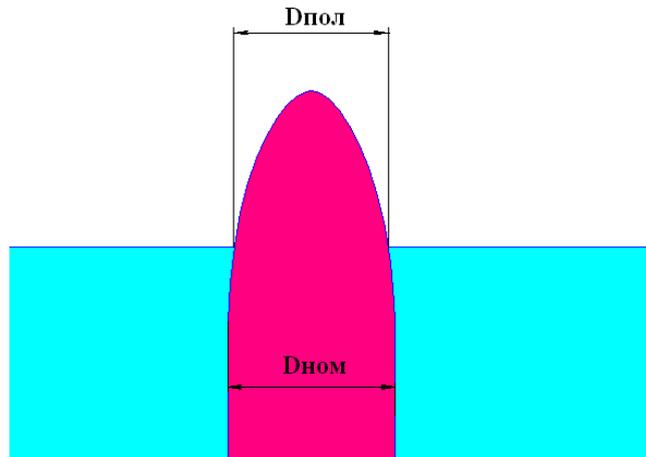


Рис. 2. Сокращение вылета затвора транзистора за границу активной области

Скругление и сокращение вылета приводит к уменьшению длины канала транзистора на границе активной зоны и, как следствие, к изменению его электрических характеристик. Для оценки этого сокращения со стороны «свободного» края каждого проводника добавлен вспомогательный проводник с аналогичными характеристиками фигур ОРС, расположенный «встык» на расстоянии 0,6 мкм (рис. 3). В этом случае сокращение вылета может быть рассчитано, как $\Delta = |0,6 - \text{измеренное расстояние}| / 2$.



Рис. 3. Эскиз шины с вспомогательным проводником, расположенным «встык»

Фигуры коррекции типа «assist line» позволяют обрабатывать одиночные элементы в тех же технологических режимах, которые обычно характерны для плотноупакованных элементов. Фигуры коррекции типа «bias» позволяют варьировать ширину шины.

На графике рисунка 4 представлены результаты измерения ширины одиночного элемента в зависимости от значения фокуса оптической системы степпера, имевшего на шаблоне размер 0,24 мкм, после травления:

1. измерения «сверху» (нижний график);
2. измерения на сколе по основанию профиля (верхний график).

Измерения на сколе гораздо более сложные, нежели измерения «сверху», т.к. они требуют особой топологии тестовых структур, сложного алгоритма поиска и измерения, и предварительной подготовки образцов для измерений. Для проведения измерений на сколе необходимо расколоть кремневую пластину точно в месте прохождения подлежащих измерению структур, т.е. пластина разрушается при этих измерениях. Поэтому такой метод измерений может быть использован только в условиях эксперимента, но не на опытных партиях. Однако этот метод дает точные показания и позволяет получить значение ширины шины на конкретной высоте полученного профиля.

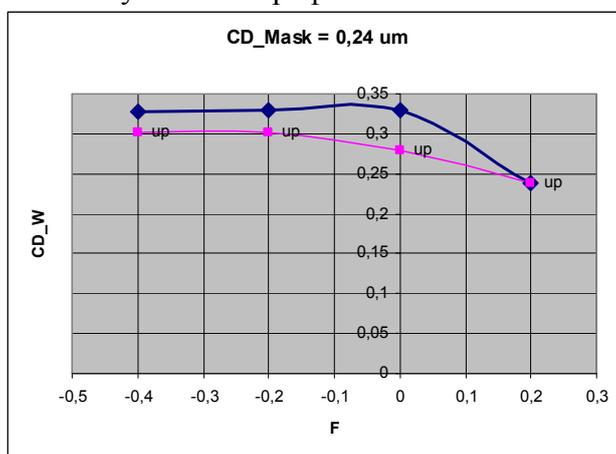


Рис. 4. Сравнение способов измерения на SEM

Сравнения этих кривых позволяют сделать вывод о том, что измерения сверху на SEM **после травления** дают высокую точность, отличаясь от более точных измерений на сколе, на фиксированную величину постоянного знака (т.к. измерения сверху соответствуют измерению на определенной высоте профиля). Полученные результаты позволили в последующих экспериментах проводить измерения «сверху».

Экспериментальная часть

Результаты компьютерного моделирования шин без корректирующих элементов представлены на рисунках 5а и 5в. В этом случае наблюдается существенное увеличение расстояния между концами элементов (с 0,6 мкм до 1,12 мкм), а также значительный уход фоторезиста на краю профиля шины (рис. 5а).

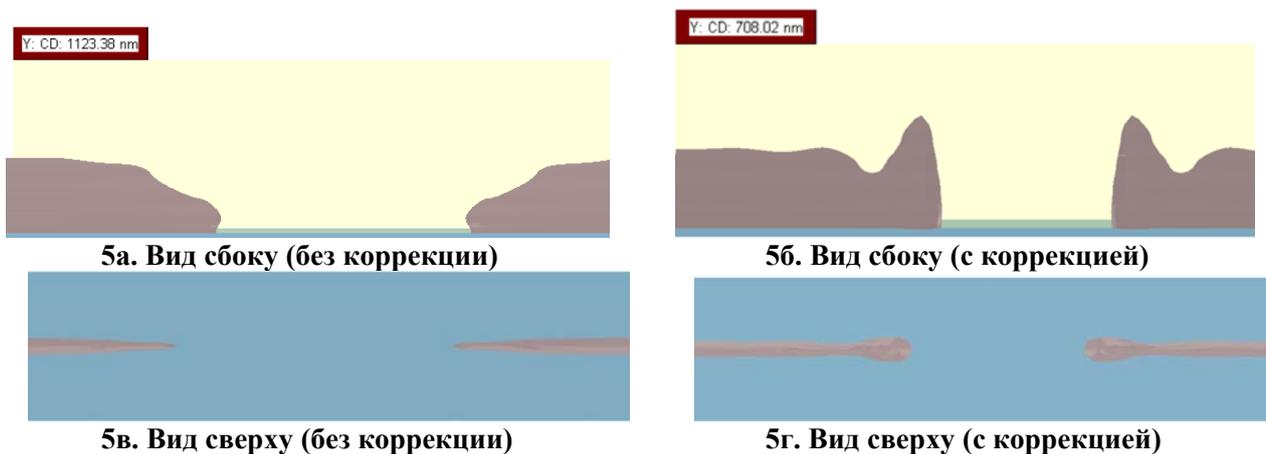


Рис. 5. Результаты моделирования при введении OPC-serif.

При введении коррекции (рис. 5б и 5г), величина описанных выше геометрических искажений размеров элементов снижается (расстояние – 0,708 мкм), однако наблюдается эффект перекомпенсации (рис. 5б). Для подтверждения адекватности предложенной компьютерной модели были проведены проверочные эксперименты (рис. 6).

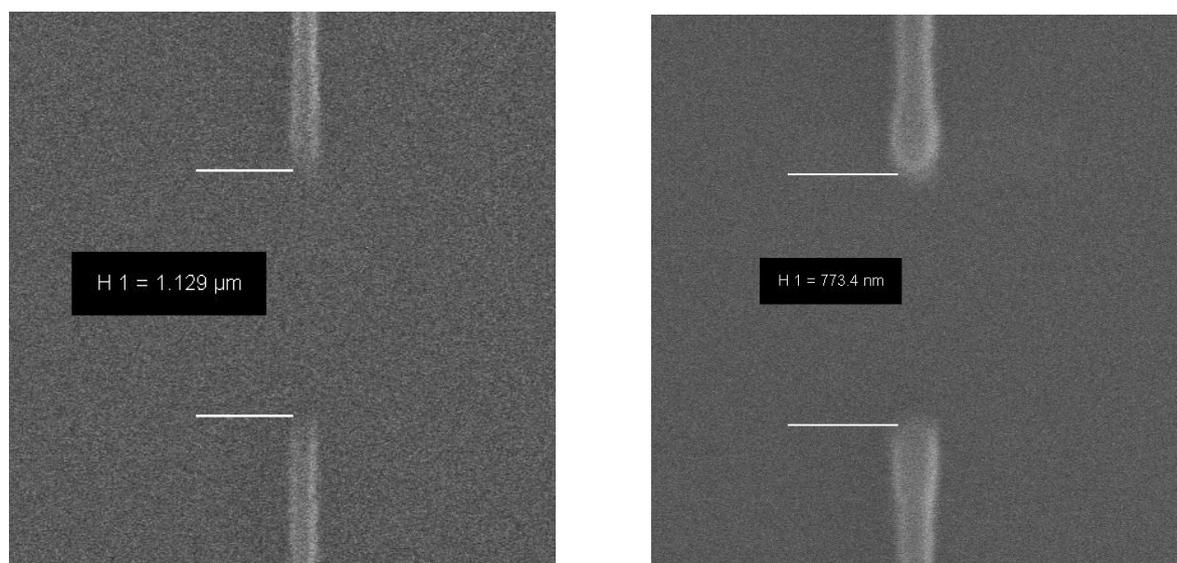


Рис. 6. Результаты измерения на пластине при введения OPC-serif.

На рисунке 6а представлена SEM-фотография одиночной структуры номинальным размером 0,23 мкм без коррекции. На приведенной фотографии хорошо заметно, что концы проводников «рванные», а расстояние между концами увеличилось с 0,6 мкм (на шаблоне) до 1,13 мкм (на резистивной маске (РМ)). Введение OPC-структур типа serif (рис. 6б) позволило получить проводники более правильной формы (наблюдается равномерность толщины фоторезиста) и сократить расстояние между концами проводников, приблизив его к номинальному значению (расстояние по РМ = 0,77 мкм).

«Рваные» края проводников (рис. 6а) объясняются малой толщиной слоя фоторезиста в этих местах, что было показано средствами компьютерного моделирования профиля одиночной шины с примыканием «встык» (рис. 5а). Измерения, выбранного в качестве показателя качества расстояния между шинами, также подтвердили соответствие результатов моделирования и проведенным экспериментом. Сравнение результатов компьютерного моделирования и эксперимента на пластине показало, что для одиночных структур расхождение между ними составило менее 10% от соответствующих номинальных размеров.

Необходимо особо отметить, что представленный на рисунке 5б профиль резиста не может быть экспериментально измерен на имеющемся оборудовании. Поэтому оптимизация профиля резиста в таких местах может быть проведена **только путем компьютерного моделирования** процесса фотолитографии! По результатам такого моделирования может быть найдено компромиссное соотношение между сокращением длины шин и качеством получаемого профиля на краях резиста.

Оптимизация параметров фигур типа «serif» была проведена путем моделирования процесса литографии для одиночного элемента шириной 0,24 мкм.

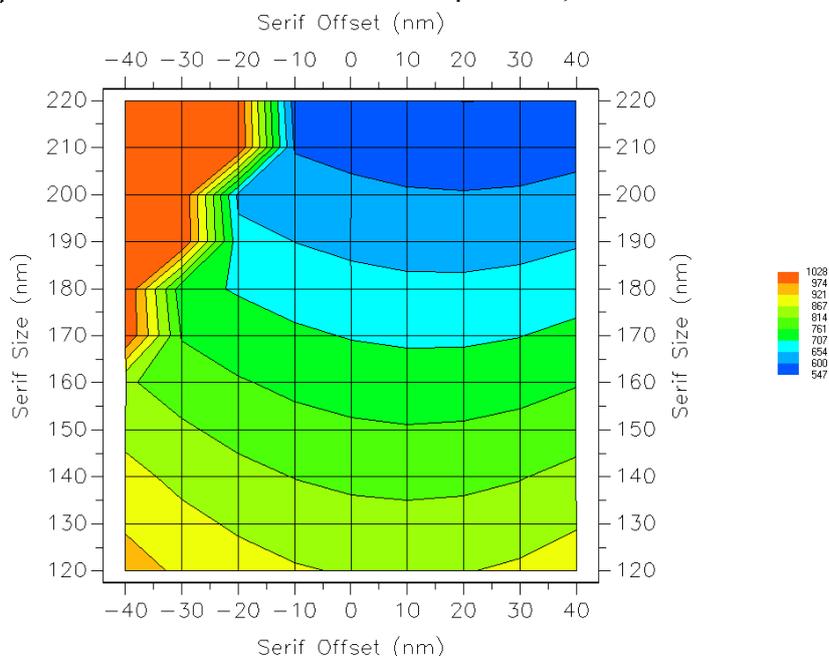


Рис. 7. Оптимизация параметров фигур OPC-serif.

Как видно из рис.7, оптимальные параметры фигур коррекции типа «serif» следующие: «serif size» 170-200 нм и «serif offset» 20-40 нм.

С целью возможности одновременной проработки одиночных и плотноупакованных структур в состав тестовых структур шаблона был включен ряд структур типа «assist line». Влияние фигур данного типа было промоделировано (рис. 8).

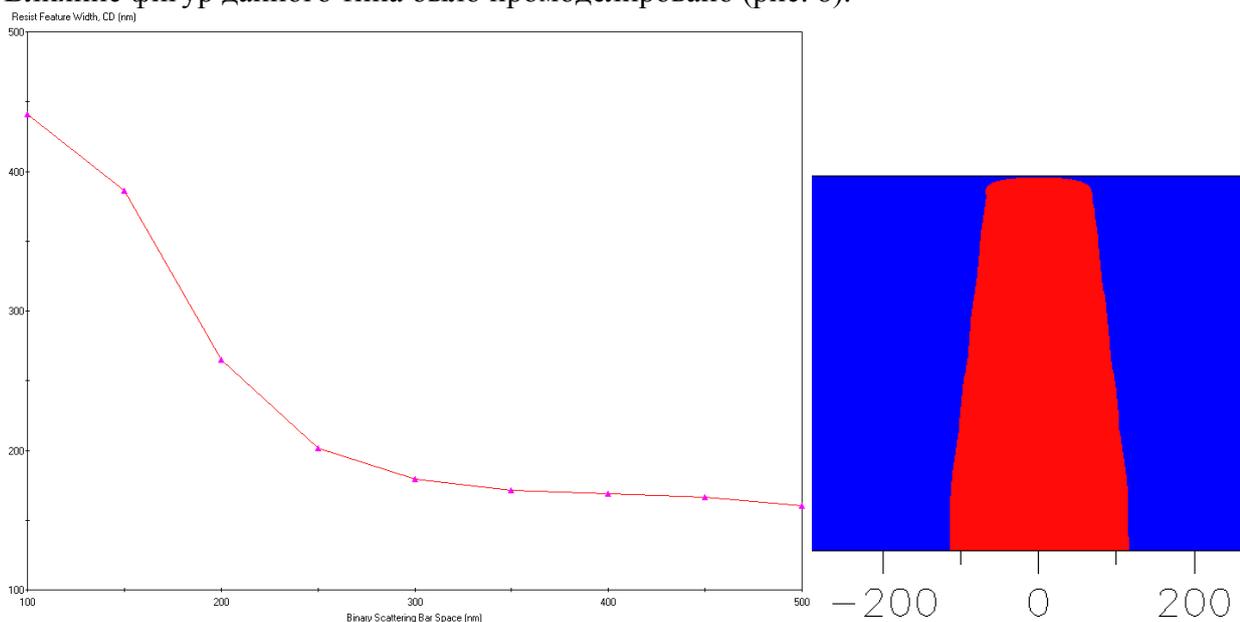


Рис. 8. Зависимость ширины одиночной шины 0,23 мкм от параметров OPC-assist line.

На рисунке 8 представлена зависимость ширины одиночной шины 0,23 мкм от параметров вводимых фигур типа «assist line». Введение данной коррекции дает возможность управлять размерами шины в пределах ± 100 нм. На рисунках 8, 9 приведены результаты эксперимента на кремниевой пластине.

Ширина одиночной шины на резистивной маске составила 110 нм. Ширина такой же шины в плотноупакованном массиве составила 180 нм. При введении коррекции с различными параметрами на одиночную шину ее ширина изменялась от 120 до 370 нм. Это позволяет сделать вывод, что оптимизация этих параметров позволит достигнуть одновременной проработки как одиночных, так и плотноупакованных структур в одном технологическом режиме литографии.

Выводы

В ходе работы были проведены исследования влияния различных типов фигур OPC на параметры тестовых структур. Результаты измерений структур с фигурами OPC показали на качественном уровне эффективность их введения. Для каждого из типов фигур OPC было проведено моделирование процесса литографии, результаты которого были подтверждены экспериментально. Полученные результаты позволяют утверждать, что введения фигур OPC существенно повысит стабильность воспроизведения и контроль над размерами транзисторных структур.

Также были определены диапазоны оптимальности параметров фигур коррекции различных типов, позволяющих в максимальной степени компенсировать эффект оптической близости. На примере одиночных структур номинальными размерами 0,23 мкм и 0,24 мкм было показано улучшение качества воспроизведения концов шин. Укорочение шин при введении фигур коррекции типа «serif» сократилось с 1,13 мкм (на РМ) до 0,77 мкм (на РМ), при нормальном значении 0,6 мкм (на шаблоне). Введение фигур типа «assist line» с различными их параметрами позволило управлять шириной шиной в достаточно широком диапазоне, что позволяет сделать вывод о возможности оптимизации этих параметров.

ВАКУУМНАЯ УСТАНОВКА МОДУЛЬНОГО ТИПА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ НАНОСТРУКТУР

Сидорова С.В., Чабанов А.А.

Научный руководитель: д.т.н., проф. Панфилов Ю.В.
МГТУ им.Н.Э.Баумана, Москва, Российская Федерация

VACUUM MODULAR COATER FOR RESEARCH OF THIN FILM'S NANOSTRUCTURE DEPOSITION

Sidorova S.V., Chabanov A.A.

Scientific leader: D.Sc., professor Panfilov Yu. V.
MSTU named after Bauman, Moscow, Russian Federation

Аннотация

Представлена вакуумная установка модульного типа для исследования процессов нанесения тонкопленочных наноструктур методами термического и дугового испарения, магнетронного распыления и стимулированного плазмой газозафазного осаждения.

Abstract

The vacuum modular coater for research of thin film's nanostructure deposition by means of thermal and arc evaporation, magnetron sputtering and PECVD methods is represented.

Разработана малогабаритная установка вакуумного нанесения тонких пленок модульного типа, предназначенная для исследовательских работ в области технологии тонких пленок в вакууме и формирования тонкопленочных наноструктур [1, 2]. Рабочая камера установки, представляющая собой изготовленный из тугоплавкого стекла цилиндр, оснащена сменными фланцами, что позволяет производить нанесение пленок различными методами и визуально контролировать процессы, происходящие в вакуумной камере. Вакуумная система установки снабжена диффузионным насосом с воздушным охлаждением (для обеспечения безмасляного вакуума предусмотрен турбомолекулярный насос) и механическим насосом.

Управление форвакуумной и высоковакуумной магистралями производится оператором при помощи электромагнитных клапанов. Напуск рабочего газа контролируется системой напуска на базе РРГ-10. Управление питанием клапанов, диффузионным и механическим насосами производится при помощи САУ. Контролировать давление можно по показаниям термопарного и ионизационного вакуумметров.

Основным достоинством установки является небольшое время откачки вакуумной камеры, что позволяет проводить большое количество опытов за рабочий день.

Технические характеристики установки:

- | | |
|-----------------------------------|---------------------|
| ➤ предельное давление, Па | $10^{-3} - 10^{-6}$ |
| ➤ давление рабочих газов, Па | 0,1 - 100 |
| ➤ скорость осаждения пленки, нм/с | $10^{-3} - 15$ |
| ➤ скорость травления слоев, нм/с | $10^{-2} - 50$ |
| ➤ потребляемая мощность, кВт | 1,5 - 5 |
| ➤ габаритные размеры, м | 0,5x1,1x1,6 |
| ➤ масса, кг | 90 |

Установка содержит следующие технологические модули: термического испарения (Рис.1), плазмо-химического осаждения (Рис.2), дугового испарения (Рис.3) и магнетронного распыления (Рис.4).

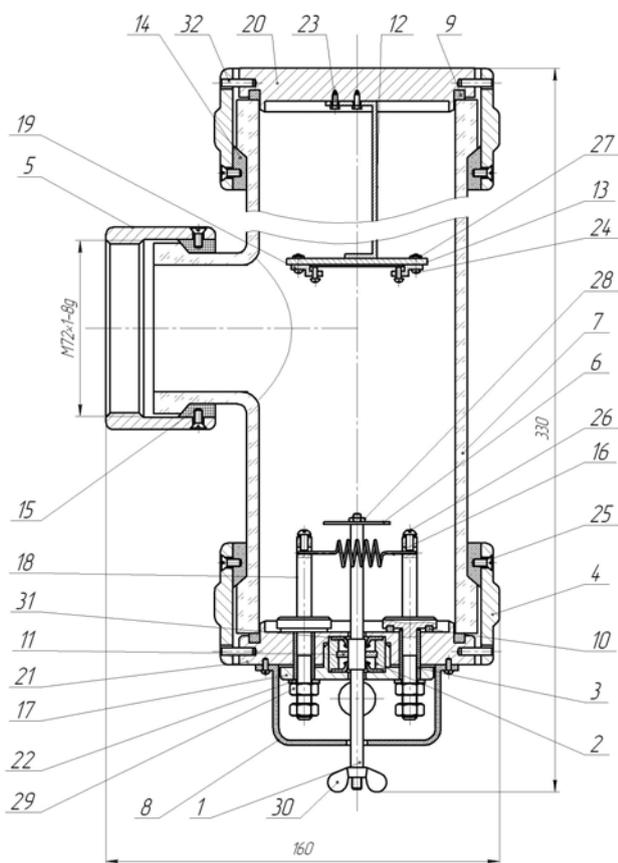


Рис. 1 Модуль термического испарения

Модуль термического испарения (см. рис.1) работает следующим образом. На нагревательную спираль 16 подается напряжение посредством токовводов 18. Токовводы размещены во фланце 21, который установлен в кварцевую вакуумную камеру 7. На фланцах 20 и 21 установлены уплотнительные прокладки 9, которые обеспечивают герметизацию объема вакуумной камеры. Подложка крепится на подложкодержатель 27, при помощи кронштейнов 19. Для выхода на заданный режим испарения предусмотрена заслонка 6, которая отводится в сторону при достижении необходимых условий испарения. Вакуумная камера 21 с технологической оснасткой посредством втулки 5 крепится к откачной системе установки

Модуль плазмохимического осаждения (см. рис.2) предназначен для изготовления наноразмерных структур из углерода и других материалов. На нагреватель 12 помещается подложка, модуль крепится к рабочей камере 16 путем поджатия втулки 4 и фиксирования штифтами 28. уплотнение осуществляется полукольцами 14. В рабочую камеру напускают рабочий газ (циклогексан C_6H_{12}), на токовводы 19, 21 подается напряжение. Зажигается плазма между анодом 1 и нагревателем-катодом. В процессе горения разряда на подложках формируются углеродные наноструктуры.

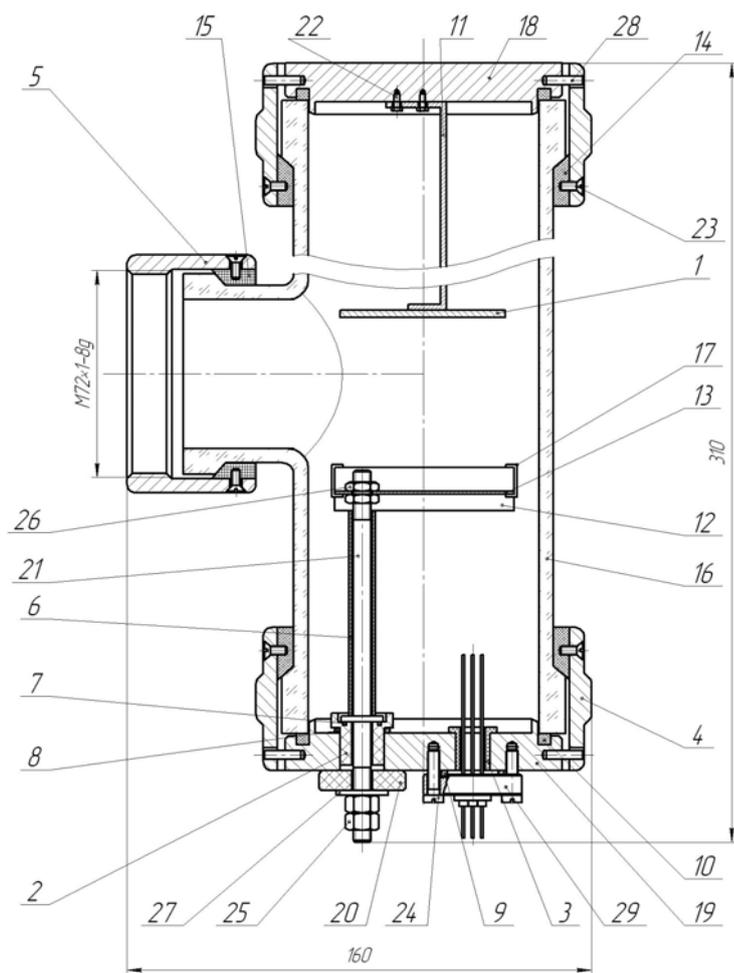


Рис.2 Модуль плазмохимического осаждения

Технологическая оснастка для метода дугового испарения (см. рис.3) собрана на съёмном фланце вакуумной камеры, на котором расположены три токоввода и один ввод вращения. На токовводах находятся стойки с электродами, один из которых неподвижен, а другой вращается в плоскости параллельной основанию фланца и приводится в движения рычагом, закрепленным на вводе вращения.

Это позволяет приводить электроды в соприкосновение при помощи внешнего рычага ввода вращения. На третьем токовводе закреплена стойка с металлическим экраном, в котором сделано отверстие для пропускания частиц к подложке и который крепится к экрану с обратной стороны зажимом. Кроме крепления и маскирования подложки экран преграждает поток рабочих частиц от дуги и препятствует загрязнению стенок камеры

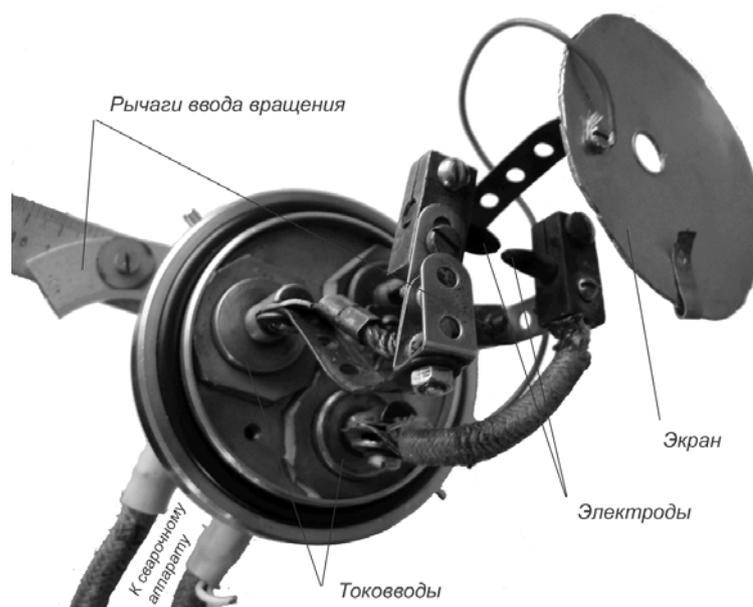


Рис.3 Модуль дугового испарения

С помощью модуля магнетронного распыления (см. рис.4) можно формировать пленки из металлов, оксидов, нитридов, а также получать различные углеродные наноструктуры, когда в качестве катода используется графитовая мишень. Газовая

система установки построена на базе двух газовых линеек, включающих регуляторы давления и расхода газа с микропроцессорным управлением.



Рис.4 Модуль магнетронного распыления

Система автоматического управления позволяет контролировать процесс получения требуемого вакуума и газовой среды, поддерживать заданные режимы работы технологических источников, управлять длительностью процесса обработки изделий и обеспечивать заданные температурные режимы.

Установка выпускается с различной комплектацией: от простейшей – с форвакуумным и диффузионным насосами, контролем вакуума, модулем термического испарения с блоком питания, полностью ручным управлением до более сложных вариантов – с турбомолекулярным насосом, многоканальной системой напуска рабочего газа, четырьмя технологическими модулями, микропроцессорной системой автоматического управления и системой управления качеством формируемых тонкопленочных покрытий и наноструктур.

Литература

1. Панфилов Ю.В.Вакуумные процессы и оборудование для нанесения тонких пленок в нанотехнологии /Вакуумная наука и техника: Материалы 13-й научно-технической конференции. Сочи, 2006 – С. 197-200.
2. Технология получения, свойства и области применения наноструктурированных материалов (обзор докладов 7-го Международного конгресса «Наноструктурированные материалы»). Справочник. Инженерный журнал. №7 (112), 2006, С.17 – 30.

ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ КМОП-СТРУКТУР

Глушко А.А.

Научный руководитель:

к. ф-м н. Амирханов А.В.,

НИИСИ РАН, Москва, Российская Федерация

Аннотация

Работа посвящена исследованию температурных зависимостей электрических характеристик КМОП СБИС при помощи современных систем конструктивно-технологического моделирования. Дана сравнительная оценка результатов моделирования и экспериментальных данных.

Abstract

This work is devoted to the research of electrical characteristics temperature dependence with the modern Technology Computer Aided Design. The comparative estimation of results of modeling and experimental data is given.

Элементарной базой современных электронно-вычислительных средств являются интегральные микросхемы. В настоящее время развиваются полупроводниковые интегральные микросхемы, изготавливаемые по КМОП-технологии – технологии, в которой элементарной ячейкой является пара полевых транзисторов с взаимодополняющими типами проводимости. Такие схемы обладают преимуществом перед другими видами интегральных микросхем благодаря высокой плотности упаковки элементов, малой потребляемой мощности, простоте исполнения.

Наряду с перечисленными достоинствами микросхемы КМОП имеют свои «слабые места». Одно из таких слабых мест – их чувствительность к температуре. С увеличением температуры сильно меняются пороговые напряжения полевых транзисторов, резко возрастают потребляемые токи и токи утечки. Следует отметить, что для вычислительных средств, работающих на базе электронных ключей, величина порогового напряжения определяет статическую помехоустойчивость в режимах логического нуля и единицы. Изменение температуры таким образом может привести к нестабильной работе всего устройства.

Поэтому разработчику схемы важно знать, как влияет температура на электрические характеристики микросхемы. Оценить эти зависимости аналитически довольно сложно, к тому же такая оценка оказывается недостаточно точной. Для получения более точного прогноза поведения микросхем в различных температурных условиях может быть использован аппарат компьютерного моделирования технологических процессов производства интегральных микросхем (Technology Computer Aided Design - TCAD). В настоящей работе для решения поставленной задачи использовался программный комплекс приборно-технологического моделирования TCAD TMA (фирма TMA Inc., USA).

Задача решалась в несколько этапов: 1) Определение точности температурных моделей TCAD. 2) Построение семейства пороговых характеристик транзисторов при различных температурах. 3) Получение зависимости электрических параметров от температуры.

На рисунке 1 приведен график, на котором построены пороговые характеристики р-канального транзистора с шириной затвора 0,5 мкм при температуре 90 °С, полученные теоретически (с использованием моделирования) и экспериментально. Как видно из графика, результат моделирования отличается от результата измерений не более, чем на 15%.

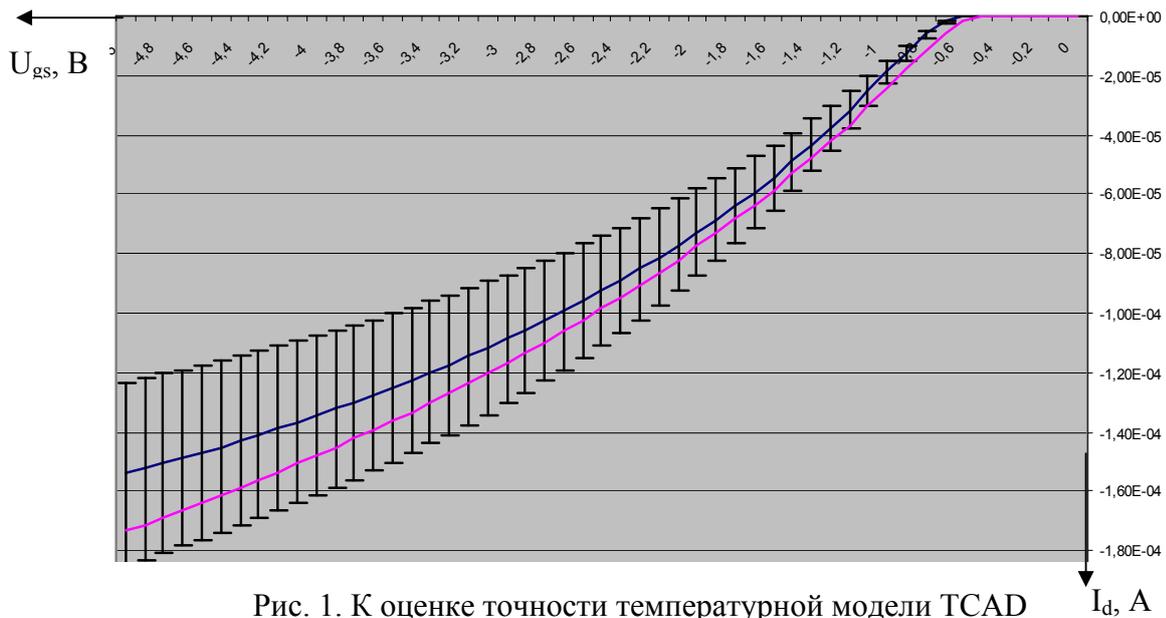


Рис. 1. К оценке точности температурной модели TCAD

Следующий этап – получение семейства пороговых характеристик. Эти характеристики строились для транзисторов с шириной поликремниевого затвора 0,5 мкм при температурах 100 К – 600 К с шагом 100 К. Семейство пороговых характеристик р-канального транзистора приведено на рисунке 2.

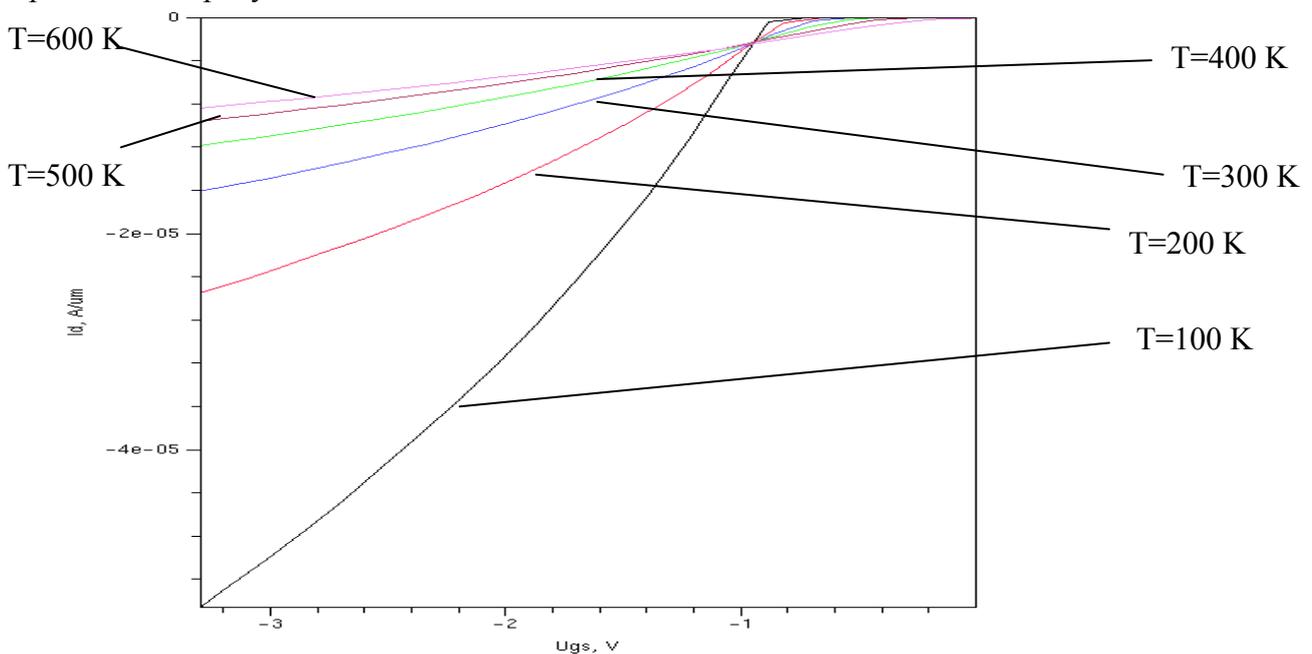


Рис. 2. Семейство пороговых характеристик р-канального транзистора

И, наконец, для построения зависимости порогового напряжения от температуры необходимо составить таблицу значений пороговых напряжений. Следует отметить, что пороговое напряжение в нашем случае будет определяться следующим образом: на стокзатворной характеристике определяется точка перегиба графика, и в этой точке проводится касательная. Абсцисса точки пересечения этой касательной с горизонтальной осью и определяет пороговое напряжение. Иллюстрация к нахождению порогового напряжения дана на рисунке 4.

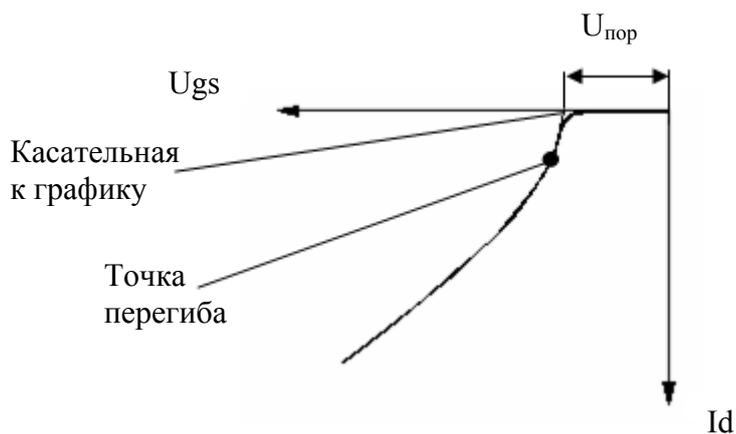


Рис. 4. К определению порогового напряжения

Результатом работы стала зависимость порогового напряжения от температуры, построенная с помощью приложения Microsoft Excel. Эта зависимость приведена на рисунке 5.

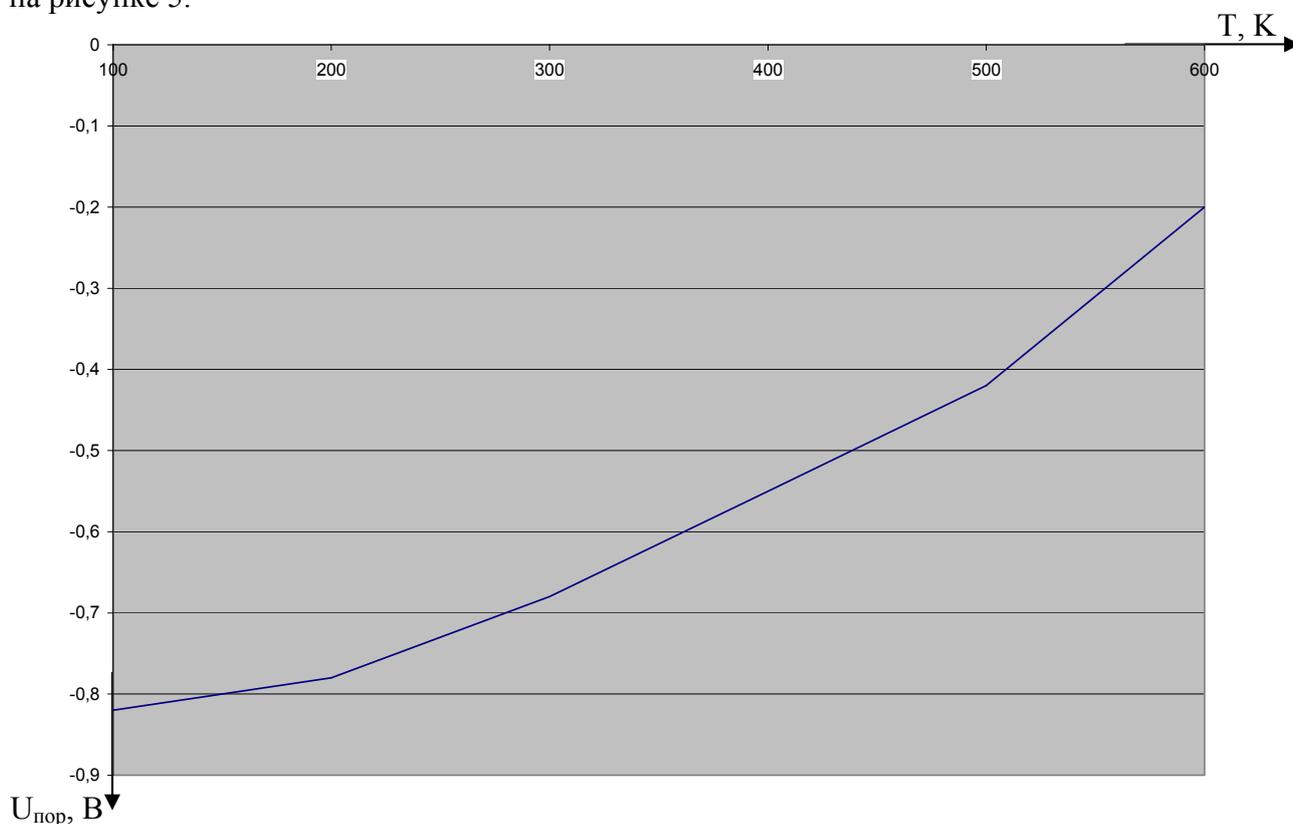


Рис. 5. Зависимость порогового напряжения от температуры

Как видно из графика на рис. 5, абсолютное значение порогового напряжения уменьшается с увеличением температуры. Это происходит из-за увеличения концентрации неосновных носителей в кармане полевого транзистора, что облегчает условия формирования проводящего канала, и индуцированный канал возникает при меньшем напряжении на затворе. При увеличении температуры на 500 К пороговое напряжение уменьшилось на 0,6 В по абсолютной величине. Учитывая, что пороговое напряжение при обычных условиях для технологии с проектными нормами 0,5 мкм обычно предполагается равным 0,7 В для транзисторов такого типа, становится очевидно, что температурный диапазон работы микросхемы следует ограничить. При высоких температурах КМОП-структуры практически теряют те свойства, благодаря которым они нашли применение в современном производстве интегральных микросхем. На практике допускается изменение

порогового напряжения в пределах 0,65 .. 0,75 В. Это соответствует на графике температурному диапазону 250...330 К.

Литература

1. Ферри Д., Эйкерс Л., Гринич Э. Электроника ультрабольших интегральных схем: Пер. с англ.– М.: Мир, 1991.– 327 с.: ил.
2. Ir. H.J.M. Veendrick. Deep-Submicron CMOS ICs, Second Edition, 2000, Kluwer academic publishers, 526 pp.
3. H.W. Kennel, S.M. Cea, A.D. Lilak, P.H. Keys, M.D. Giles, J. Hwang, J.S. Sandford, S.Corcoran. Modeling of ultrahighly doped shallow junctions for aggressively scaled CMOS, Electron Devices Meeting, 2002. IEDM '02.Digest. International, pp. 875-878
4. P. Sixt. Optical Proximity Correction (OPC). Technology Review, Volume 1, Issue 7, April 2003, pp. 1-8.

ПРОБЛЕМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ СУБМИКРОННЫХ СТРУКТУР В СИСТЕМЕ TCAD

Глушко А.А.

Научные руководитель: к. ф-м н. Амирханов А.В.,
НИИСИ РАН, Москва, Российская Федерация

Аннотация

В работе освещены основные проблемы, с которыми сталкивается оператор при моделировании в TCAD. Проанализированы возможные причины плохой сходимости решения, полученного при использовании модифицированного метода Ньютона. Оператору даны рекомендации для улучшения сходимости решения.

Abstract

The problems which operator in TCAD collides with are lighten in this work. Causes of bad convergence in modified Newton method are analyzed. The recommendations of convergence improvement of the method are given to operator.

Моделирование физических процессов, протекающих в полупроводниковых интегральных микросхемах, состоит из нескольких этапов. Среди них можно выделить следующие:

1. Качественное описание физического процесса;
2. Построение (выбор) математической модели процесса (составление системы дифференциальных уравнений);
3. Переход от системы дифференциальных уравнений к системе нелинейных уравнений, неизвестными в которых являются интересующие параметры. Такой переход выполняется с помощью метода конечных элементов или метода конечных разностей;
4. Решение полученной системы нелинейных уравнений. Наиболее распространенный метод решения - модифицированный метод Ньютона.

Эта методика используется в системе приборно-технологического моделирования TCAD

Одна из основных проблем, с которой сталкивается оператор, – проблема сходимости решения нелинейной системы. Процедура моделирования затягивается иногда на многие часы. При этом нет никакой гарантии, что процесс завершится без ошибок. Модифицированный метод Ньютона может сходиться с достаточно большой скоростью, но может и не сойтись вообще.

Следует добавить, что сходимость модифицированного метода Ньютона гарантируется только для монотонных функций, не имеющих точек перегиба в интервале сходимости. Вопросы, связанные с исследованием функции, у которой знаки первой и второй производной меняются в интервале сходимости, применительно к системе моделирования TCAD в литературе не освещены.

В данной работе исследованы вопросы сходимости решения для функции, которая не обладает монотонностью на интервале сходимости.

В модифицированном методе Ньютона очередное приближение x_{i+1} к корню уравнения $f(x)=0$ определяется как

$$x_{i+1}=x_i - af(x_i)/f'(x_i),$$

где a – параметр скорости сходимости решения. Если решение не сходится, программа TCAD уменьшает параметр скорости сходимости. Однако не во всех случаях такой подход приемлем. Часто оператору приходится вмешиваться в процесс моделирования. Однако у него нет никаких рекомендаций по выбору оптимальных параметров, обеспечивающих сходимость процесса моделирования.

Определить тактику работы при помощи экспериментов в самой системе TCAD не представляется возможным. TCAD является для пользователя «черным ящиком», и подбор технологических режимов для исследования всевозможных случаев сходимости был бы очень трудоемок и сложен. А о возможных ошибках оператора, пытающегося «перебороть» столь сложную систему говорить и не приходится.

Чтобы найти путь к улучшению сходимости решения, на языке Си была написана программа, моделирующая поведение TCAD, и решающая нелинейное уравнение $f(x)=0$ с одной неизвестной. В качестве функции $f(x)$ в программе использовалась $f(x)=x+\sin 2x$. График этой функции приведен на рисунке 1.

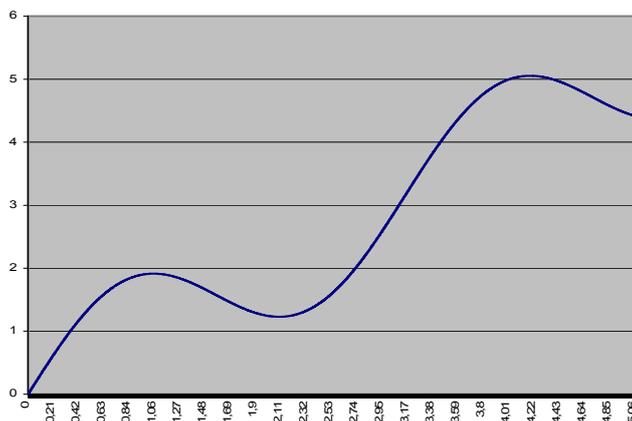


Рис. 1. К исследованию сходимости модифицированного метода Ньютона для функции $f(x)=x+\sin 2x$

Из рисунка видно, что данная функция немонотонна, а знак ее второй производной меняется периодически. То есть данная функция представляет собой наиболее неблагоприятный вариант для модифицированного метода. Если для этой функции будут получены рекомендации по оптимизации процесса сходимости, то для большинства процессов, моделируемых в TCADe, эти рекомендации сохранят свою силу.

Сущность моделирования сводилась к заданию различных начальных условий, к которым относятся: начальная скорость сходимости, начальное приближение к корню уравнения, параметр уменьшения скорости сходимости, максимально допустимое количество итераций.

Результаты экспериментов, в которых варьировались начальное приближение и скорость сходимости, приведены в таблице 1.

Рекомендации, приведенные в таблице 1, необходимы, но недостаточны для использования при моделировании в TCAD. Сама система компьютерного моделирования при нарушении сходимости лишь уменьшает скорость сходимости. Как видно из таблицы 1, это не всегда гарантирует сходимость. Ликвидировать этот недостаток можно путем разбиения всего процесса моделирования на подпроцессы. Поясним это на примере.

Предположим, требуется построить зависимость тока стока полевого транзистора от напряжения затвор-исток в диапазоне от 0 до 3,3 В. В этом случае интервал изменения напряжения можно разбить на три подинтервала: от 0 до 1,1 В, от 1,1 до 2,2 В, от 2,2 до 3,3 В. Такое разбиение позволяет в процессе моделирования увеличить скорость сходимости, так как в начале каждого из подинтервалов происходит ее инициализация.

Количество подинтервалов может быть и большим. В этом случае точки разбиения выбираются экспериментально, но в местах нарушения сходимости их следует располагать чаще.

Таблица 1. Рекомендации по моделированию

№	Поведение погрешности	Причина	Рекомендации
1.	Монотонное возрастание погрешности	Слишком большая скорость сходимости	Уменьшить скорость сходимости
2.	Монотонное убывание	Малое максимальное	Увеличить

	погрешности с большой скоростью; заданная точность не достигается	количество итераций	максимальное количество итераций счета
3.	Монотонное убывание погрешности с малой скоростью	Малая скорость сходимости	Увеличить скорость сходимости
4.	Немонотонное изменение погрешности	Слишком большая скорость сходимости	Уменьшить скорость сходимости; увеличить максимальное количество итераций
5.	Немонотонное изменение погрешности при уменьшении скорости сходимости	Неудачное начальное приближение	Изменить начальное приближение

Кроме того, учитывая особенности структуры самой системы TCAD, можно привести еще одно соображение, доказывающее улучшение сходимости. При разбиении каждый из подынтервалов изменения напряжения меньше всего интервала моделирования. Учитывая, что граничным значениям напряжения на каждом интервале ставятся в соответствие значения 0 и 1 внутреннего параметра TCAD t , приращение которого характеризует скорость сходимости, можно сказать, что при разбиении тому же приращению параметра t будет соответствовать меньшее приращение внешних условий (внешнего напряжения). Учитывая непрерывность физических процессов, можно сказать, что решение уравнения при данном напряжении будет **ближе** к решению уравнения при следующем значении внешнего напряжения, т.е. **больше вероятность попадания начального приближения** (которым является решение в данной точке) в окрестность наилучшей сходимости (где функция строго монотонна и имеет постоянную выпуклость) для последующего значения входного напряжения.

Результаты настоящей работы могут быть рекомендованы как операторам, работающим с системой TCAD, так и программистам и пользователям, использующим модифицированный метод Ньютона в решении нелинейных уравнений.

Литература

1. Васильков Ю.В., Василькова Н.Н. Компьютерные технологии вычислений в математическом моделировании: Учеб. Пособие. – М.: Финансы и статистика, 2002. – 256 с.: ил.
2. МОП СБИС. Моделирование элементов и технологических процессов/Под ред. П. Антонетти, Д. Антониадиса, Р. Даттона, У. Оулдхема: Пер. с англ.– М.: Радио и связь, 1988.– 496 с.:ил.
3. Смирнов В.И. Курс высшей математики, том первый. – М.: 1974 г., 480 стр. с илл.

ПРИНЦИПЫ ПОСТРОЕНИЯ АППАРАТНО-ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА ИЗМЕРЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Елсуков К.А., Елсукова А.А

Научный руководитель: Профессор Цыбанов Содном Жамьянович
Всероссийский Научно-Исследовательский Институт Ветеринарной Вирусологии и Микробиологии

Аннотация

В данной статье рассмотрены основные принципы построения аппаратно-программного комплекса на основе комбинированного метода измерения параметров органических соединений. Рассмотрен принцип анализа наличия необходимого нуклеотида и измерения его активности на основе измерения массы, пристыковавшейся к кантелеверу.

Abstract

In this article the basic principles of building of intellectual system for molecular diagnosis, based on combined method of organic molecules parameter measurement, are spotted out. The principle of analysis of needed nucleotide and its activity, based on the cantilever mass shift, is reviewed.

Актуальность и постановка задачи

Данный проект направлен на создание интеллектуального аппаратно-программного комплекса молекулярной диагностики на основе зондовой микроскопии для решения задач

- Прямой визуализации органических соединений
- Измерения параметров и свойств нуклеиновых кислот
- Измерения массы активного биологического соединения

В данном проекте приведённые выше задачи измерения биологической массы решаются при помощи её соединения с антителом, присоединённым к высокочувствительному элементу – микрокантелеверу. Данный комплекс может быть использован для диагностики рака и других злокачественных образований, проведения исследований органических соединений, определения вирусов в реальном времени.

В общем случае методы молекулярной диагностики можно подразделить на химические, физические, оптические, а также комбинированные, которые сочетают в себе все эти методы. Химические методы – это наборы реагентов, а также ДНК-зонды; физические методы основаны на применении зондовых и электронных микроскопов, а оптические – на измерении оптических свойств исследуемых молекул и соединений. Однако каждый из указанных методов обладает некоторыми недостатками. Тогда как комбинированный метод, представленный в данном проекте, сочетает в себе преимущества всех трёх методов.

Основные результаты и научная новизна

В разрабатываемом методе чувствительным элементов является микрокантелевер, свойства которого изменяются в процессе проведения эксперимента. Как известно, собственная резонансная частота кантелевера в данном случае измерить по формуле

$$f = 1 / 2\pi \sqrt{k/m} \quad (1)$$

При присоединении к нему определённой массы его собственная масса изменяется, соответственно, изменяется и резонансная частота. Разницу масс можно посчитать по формуле

$$\Delta m = k/4n\pi^2 (1/f_1^2 - 1/f_0^2) \quad (2)$$

Метод определения резонансной частоты кантелевера сход с методом определения резонансной частоты кантелевера сканирующего зондового микроскопа. Измерения проводятся при помощи пьезостолика, на который устанавливают кантелевер. На него падает луч лазера, отражается от поверхности и попадает на ПЗС. Для точного позиционирования лазера используется оптический микроскоп.

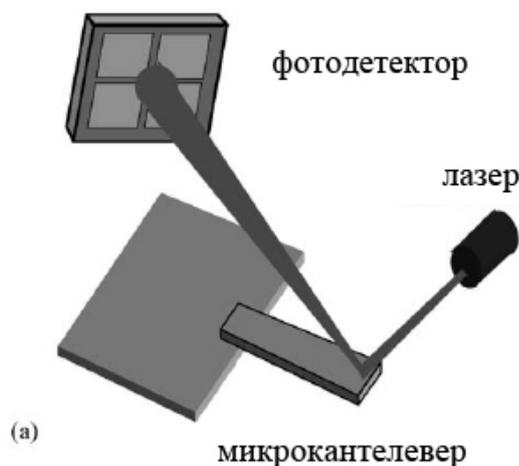


Рисунок 1 – схема измерения резонансной частоты

При помощи генератора задающей частоты на столик подаются вибрации в заданном диапазоне и с заданным шагом изменения частоты. При достижении резонансной частоты кантелевер начинает совершать колебания с более высокой амплитудой, что регистрируется повышением напряжения на ПЗС-матрице. Далее кантелевер проходит несколько ступеней биологической обработки, во время которой происходит активация его поверхности, присоединение к ней белка либо нуклеиновой кислоты или вируса, а также взаимодействие с антителом. На каждом шаге измерялась резонансная частота. При увеличении массы кантелевера его резонансная частота уменьшается, таким образом при можно измерить пристыковавшуюся массу и точно идентифицировать присоединенное вещество.

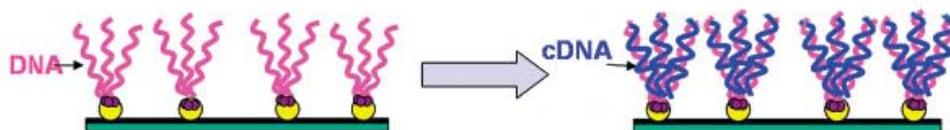


Рисунок 2 – схема гибридации ДНК

Одним из таких веществ может являться молекула ДНК и молекула, гибридная к ней. Тогда при помощи Как вы знаете, ДНК состоит из двух нитей нуклеотидов, оборачивающих друг друга, образуя двойную спираль. Эти две нити удерживаются вместе с помощью водородных связей между основаниями одной нити, образующих пары с основаниями другой нити. Предположим, что мы начали с двух полностью различных молекул ДНК. Мы смешиваем их, переплавляем и отжигаем отдельные нити. Каждая отдельная нить распознает и образует парные соединения со своей первоначальной комплиментарной нитью (Рисунок 2). С другой стороны, мы можем использовать две близко родственные молекулы ДНК. Хотя их последовательности не совпадают полностью, тем. не менее, если они достаточно похожи, возникнут связи между некоторыми парами оснований. В таком случае мы получим молекулы гибридной ДНК.

Один из способов применения гибридации - нахождение генов для клонирования. Предположим, что мы уже имеем ген гемоглобина человека и хотим выделить соответствующий ген гориллы. Сначала мы поместим человеческий ген на фильтр. Затем возьмем образец ДНК гориллы и разрежем его на короткие сегменты с помощью соответствующего рестрикционного фермента. После чего нагреем ДНК гориллы, чтобы ее денатурировать и пропустим полученный раствор через фильтр. Фрагмент ДНК, содержащий ген гемоглобина гориллы, присоединится к гену гемоглобина человека и останется на фильтре. Остальные гены просто пройдут через фильтр. Этот подход позволяет нам выделить новые гены, поскольку мы уже имеем известный родственный ген, достаточно близкий по последовательности, чтобы гибридация прошла успешно.

Целый ряд методов, основанных на гибридизации, используется в молекулярной биологии для анализа. Основная идея в каждом случае заключается в том, что мы имеем известную последовательность ДНК, выступающую в роли «детектора». Обычно молекула детектор помечается с помощью радиоактивности или флуоресценции, чтобы ее легче было обнаружить. Детектор используется для поиска идентичных или похожих последовательностей в нашем экспериментальном образце или интересующих нас молекулах. Как детектор, так и исследуемая ДНК должны пройти определенную обработку, чтобы образовались одонитевые молекулы ДНК, которые могут гибридизоваться, образуя связи между парами оснований. Это делается с помощью нагревания или щелочной денатурации.

Литература

1. Roberts E., Card L. (1933). V World Poultry Congr., 2, 353.
2. Morley F., Smith J. (1954). "Agric. Gaz. N. S. Wales" 65, N. 1, 17.
3. Saeki J., Kondo K., et al. (1956). "Jpn. J. Breed." 6, N. 1, 65.
4. Warren D. (1934). "Genetics" 19 600.
5. Дубинин Н. П., Глембоцкий Я. Л. (1967) Генетика популяций и селекция. М.: Наука с. 487, 496.
6. К. Вилли (1964) Биология. М. Мир. 678 с.
7. R. Wiesendanger, Scanning Probe Microscopy and Spectroscopy, Cambridge Universtiy Press, Cambridge (1994)
8. R. Dagani, Individual Surface Atoms Identified, Chemical & Engineering News, 5 March 2007, page 13. Published by American Chemical Society
9. V. J. Morris, A. R. Kirby, A. P. Gunning, Atomic Force Microscopy for Biologists. (Book) (December 1999) Imperial College Press.
10. R. H. Eibl, V.T. Moy, Atomic force microscopy measurements of protein-ligand interactions on living cells. Methods Mol Biol. 305:439-50 (2005)
11. R. V. Lapshin, O. V. Obyedkov, [Fast-acting piezoactuator and digital feedback loop for scanning tunneling microscopes](#), Review of Scientific Instruments, vol. 64, no. 10, pp. 2883-2887, 1993.
12. Eibl RH, First measurement of physiologic VLA-4 activation by SDF-1 at the single-molecule level on a living cell. In: Advances in Single Molecule Research for Biology and Nanoscience. Hinterdorfer P, Schuetz G, Pohl P (Editors), Trauner, ISBN (2007).
13. West P, Introduction to Atomic Force Microscopy: Theory, Practice and Applications --- www.AFMUniversity.org

ПОЛЕВОЙ ТРАНЗИСТОР НА ОСНОВЕ ВЕРТИКАЛЬНЫХ КОМПОЗИЦИЙ НАНОТРУБОК

Минеев А. Г.
МФТИ, Россия

VERTICAL CARBON NANOTUBE FIELD EFFECT TRANSISTOR

Mineev A. G.

Аннотация

Рассмотрены методы получения нанотрубок, анализируется их структура. Представлена информация об электрических и механических свойствах нанотрубок. Отдельное внимание уделяется вопросу о перспективе использования нанотрубок в нанoeлектронике, в частности рассмотрена модель и способ получения полевого транзистора на вертикальных нанотрубках.

Abstract

Nanotube fabrication techniques are considered and possible nanotube structures analysed. Data on electrical and mechanical properties is presented. Potential applications in nanoelectronics, in particular, pattern and method of producing field emission transistor based on vertical carbon nanotube is emphasized.

Углеродные нанотрубки представляют собой цилиндрическую структуру диаметром от одного до нескольких десятков нанометров, которая состоит из одной или нескольких свернутых в трубку гексагональных графитовых плоскостей (графенов). К уникальным свойствам нанотрубок можно отнести их высокую прочность (модуль Юнга однослойной нанотрубки достигает величин порядка 1-3 ТПа), удельное сопротивление нанотрубок (изменяется в пределах – от $5,1 \cdot 10^{-6}$ до 0,8 Ом/см). Минимальное удельное сопротивление на порядок ниже, чем у графита. Большая часть нанотрубок обладает металлической проводимостью, а меньшая проявляет свойства полупроводника с шириной запрещенной зоны от 0,1 до 0,3 эВ.

Способов получения углеродных нанотрубок довольно много. В настоящее время наиболее широко распространены 3 метода получения углеродных нанотрубок: в дуговом разряде, лазерное испарение и осаждение из газовой фазы. К плюсам первых двух методов можно отнести сравнительно высокий процент получения одностенных углеродных нанотрубок (рисунок 1).

Однако наиболее перспективным методом является осаждение из газовой фазы, так как он имеет достаточно высокую производительность и возможность получать углеродные нанотрубки высокого качества сразу на подложке. Изменяя нагрев камеры можно контролировать диаметр нанотрубок в пределах от 0,9 до 1,4 нм.

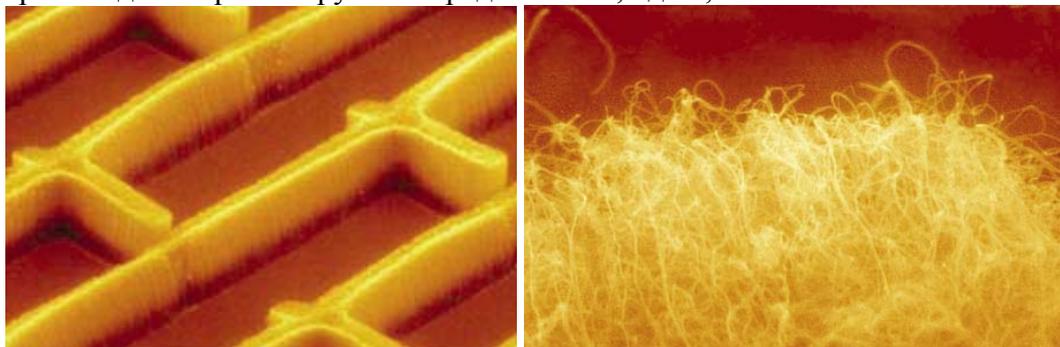


Рисунок 1 - Электронная микрофотография CNT, выращенных перпендикулярно к подложке

Область исследований, связанная с синтезом, изучением и применением нанотрубок, является одним из направлений нанотехнологий. Благодаря миниатюрным размерам и уникальным физико-химическим свойствам CNT обладают значительным прикладным потенциалом, что привлекает к ним интерес со стороны инженеров и исследователей. Для

достижения больших скоростей и более высокой степени интеграции необходимо уменьшение размеров кремневых интегральных микросхем. Однако, как известно, у кремниевых элементов существуют фундаментальные ограничения, связанные с квантово-механическими эффектами, которые проявляются в нанометровом диапазоне. Другое ограничение – минимальная длина излучения, используемого в фотолитографии.

Структуры типа CNT-FET (полевой транзистор на углеродной нанотрубке) позволят обойти эти ограничения за счёт применения иного принципа формирования транзисторной структуры. Полевой транзистор на углеродной нанотрубке является аналогом МДП-транзистора. В обычных устройствах в качестве материала канала, соединяющего сток D и исток S, выступает кремний, тогда как у полевого транзистора на углеродной нанотрубке каналом является нанотрубка (рисунок 2).

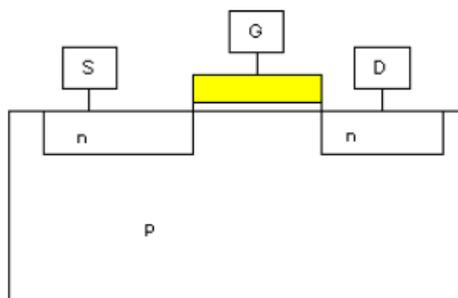


Рисунок 2 – схема МДП-транзистора

На сегодняшний день для создания полевого транзистора на основе углеродных нанотрубок используется схема, в которой CNT выращивается параллельно подложке. Однако самая высокая плотность расположения транзисторов на основе нанотрубок будет достигнута при вертикальном расположении нанотрубок (рисунок 4).

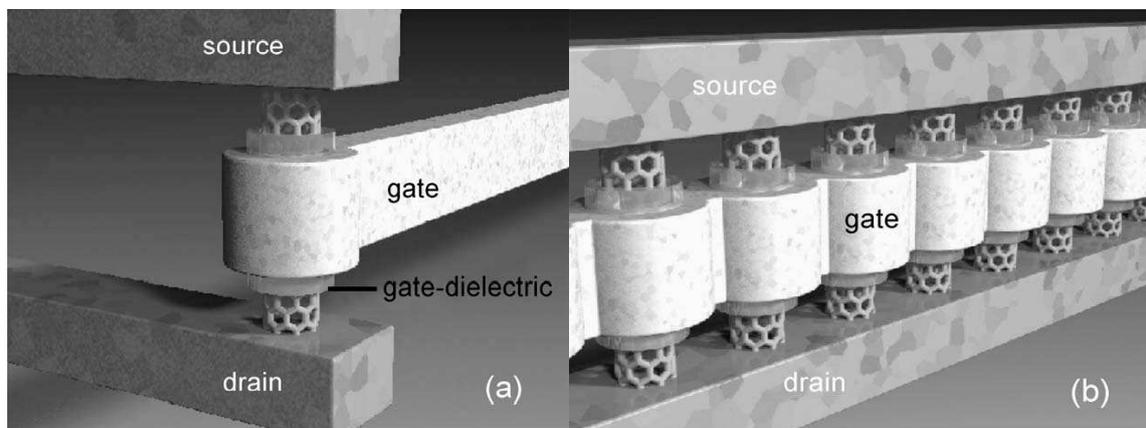


Рисунок 4 - Схематическое изображение вертикального CNT-FET (a); массив вертикальных CNT-FET (b)

Вместе с тем, это влечет за собой проблемы совмещения и соблюдения заданных размеров. Во-первых, необходимо сделать отверстия в диэлектрическом материале диаметром несколько нанометров. В нижней части отверстия должен быть проводящий слой, а затвор должен быть интегрирован в диэлектрик. Во-вторых, нанотрубки с заданными электронными свойствами необходимо выращивать строго внутри отверстия (рисунок 5).

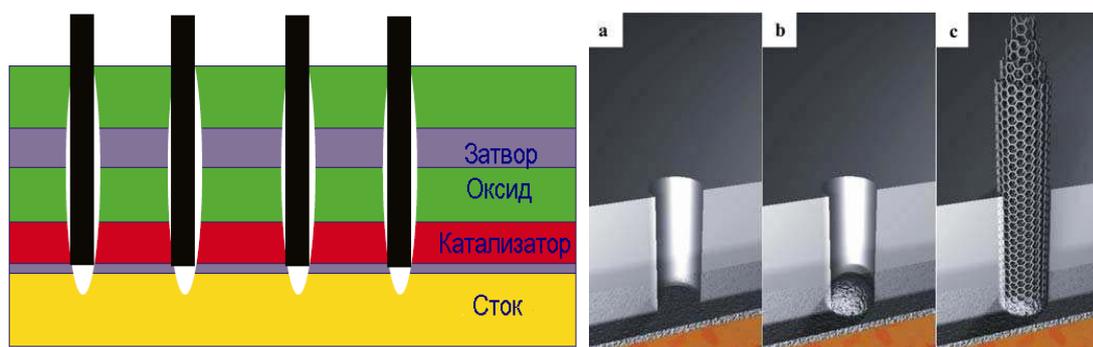


Рисунок 5 - Структура массива VCNT-FET (слева); процесс получения CNT в отверстии (справа)

Ещё одной задачей исследователей является реализация хороших нижних контактов, так как для роста нанотрубок необходимо поместить катализатор поверх оксида, что создаёт дополнительный туннельный барьер.

Рассмотренная выше конструкция позволяет сформировать транзисторные структуры с длиной канала до 10 нм и формировать на их основе интегральные микросхемы высокой плотности. Применение углеродных нанотрубок в качестве канала позволяет реализовать на практике их уникальные физические свойства, что позволит создавать высокопроизводительные электронные устройства.

Литература

1. W.Hoenlein, F.Kreupl, G.S.Duiseberg, A.P.Graham, M.Liebau, R.Seidel, E.Unger: "Carbon nanotubes for microelectronics: status and future prospects", Mater. Sci. Eng. C 23, 663 (2003);
2. Franklin, N. R.; Dai, H. Adv. Mater. 2000, 12, 890.
3. Reynhout X. E. E., Reijenga I. J. C., Notten P. H. L., Niessen R. A. H., The Wondrous World of Carbon Nanotubes. – Eindhoven, Holland: Eindhoven University of Technology, 2003.
4. Saito, Y. Preparation and Properties of Carbon Nanotubes. // Proceedings of the 1999 International Symposium on Micromechatronics and Human Science – NY, USA: IEEE, 1999.
5. Vac J., CVD nanotube growth // Science, № 97 – NY, USA: American Association for the Advancement of Science, 2004.
6. Bachilo, S. M., et al., J. Am. Chem. Soc. (2003) 125, 11186; Li, Y., et al., Nano Lett. (2004) 4, 317.
7. Chen, Y. C., et al., Appl. Phys. Lett. (2002) 81, 975.
8. Graham, A. P., et al., Diamond Relat. Mater. (2004) 13, 1296.
9. Wind, S. J., et al., Appl. Phys. Lett. (2002) 80, 3817; Avouris, P., et al., Proc. IEEE (2003) 91, 1772.
10. Javey, A., et al., Nat. Mater. (2002) 1, 241; Nano Lett. (2004) 4, 447.
11. Meyyappan, M.; Delzeit, L.; Cassell, A.; Hash, D. Plasma Sources Sci. Technol. 2003, 12, 205.
12. Han, J. H.; Yoo, J. E.; Lee, C.-J. J. of Korean. Phys. Soc. 2001, 39, 116.
13. Zhang, R. Y.; Amlani, I.; Baker, J.; Tresek, J.; Tsui, R. K.; Fejes, P. Nano Lett. 2003, 3, 731.
14. Maruyama, S.; Kojima, R.; Miyauchi, Y., Chiashi, S.; Kohno, M. Chem. Phys. Lett. 2002, 360, 229.

ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ ПАЯНЫХ СОЕДИНЕНИЙ БЕССВИНЦОВЫМ ПРИПОЕМ (Sn99.3Cu0.7)

Фэн Лэй

Китайская Народная Республика

INVESTIGATION OF MICROSTRUCTURE OF A Sn-Cu LEAD-FREE SOLDER

Feng Lei

Supervisor Prof. Chekanov A.N.

Аннотация

Настоящая работа посвящена проблеме микроструктуры и механических свойств соединений паяных бессвинцовым припоем (Sn99.3Cu0.7). Исследован предел прочности бессвинцового припоя (Sn99.3Cu0.7) на разрыв при комнатной температуре. С помощью сканирующего электронного микроскопа изучена микроструктура бессвинцового припоя.

Abstract

This article has studied the microstructure and Mechanical Properties of lead-free, has carried on the experiment of its fracture strength under the room temperature, has analysed the welding structure with SEM (Scanning Electronic Microscope)

В последнее время все большее внимание уделяется вопросам экологической безопасности, проблемы бессвинцовой пайки вызывают повышенный интерес изготовителей радиоэлектронной техники. Бессвинцовый припой (Sn99.3Cu0.7) является одним из самых широко рекомендованных эвтектических составов бессвинцовых припоев. Температура его плавления составляет 227 °С, он обладает благоприятными механическими свойствами и может заменять собою свинцовый припой (63Sn37Pb) в монтаже микроэлектроники. Предварительные испытания показали, что по усталостным показателям данный бессвинцовый припой значительно превосходит Sn/Pb[1]. Благодаря добавлению 0,7% Cu улучшается [смачиваемость поверхности](#)[2]. Таким образом, важной проблемой выбора оптимальных параметров технологических процессов пайки бессвинцовым припоем является поиск подходящего технического процесса для бессвинцового припоя (Sn99.3Cu0.7).

Прочность соединений паяных бессвинцовым припоем

Прочность на растяжение является одним из важных свойств в использовании припоев. Чаще всего руководствуются показателями качества и прочности паяных соединений установленными ГОСТ 30535-97, в соответствии с которым, параметром прочности выбран предел прочности при растяжении. Оценка среднего арифметического и среднего квадратичного отклонения (СКО) является основой расчетов параметров надежности. Величины СКО характеризуют разброс наблюдаемых значений относительно среднего значения. Чем больше СКО, тем хуже технологический процесс.

В процессе испытаний исследовалось влияние температуры и времени пайки на прочность паяного соединения. Результаты эксперимента, приведены в таблице. При испытании разрыва, отрыв от меди не произошёл, таким образом, благодаря тому, что припой смачивает медь, достигается высокая прочность адгезии.

Таблица. Результаты эксперимента на растяжение

Технологический процесс	245 °С		250 °С		260 °С		270 °С	
	Предел прочности соединения МПа	СКО						
5 сек.	99.1	6.30	103.1	4.84	97.9	4.90	95.6	7.21
10 сек.	97.7	5.60	101.8	4.59	98.0	4.76	93.4	7.90
15 сек.	97.9	5.10	100.7	4.55	97.6	4.87		
20 сек.	94.2	5.56	100.1	4.65	96.6	5.74	84.4	8.91

Микроструктура паяных соединений

С помощью сканирующего электронного микроскопа было проведено визуальное исследование микроструктуры бессвинцового припоя после обработки поверхности паяных соединений наждачной бумагой и алмазной крошкой. Изучаемые образцы были подготовлены аналогично условиям вышеописанного испытания.

На рис. 1 показана микрофотография шлифа (x2000) паяного соединения, полученного при температуре пайки 245 °С и времени пайки 15 сек.

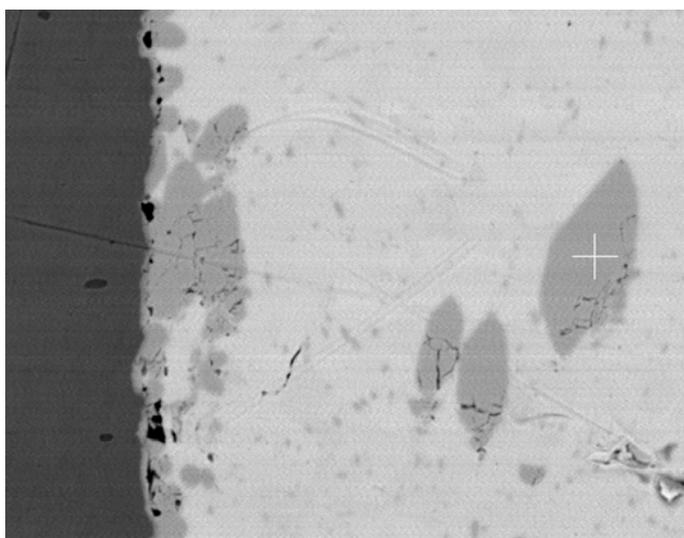


Рис. 1 Микрофотография шлифа (x2000) паяного соединения

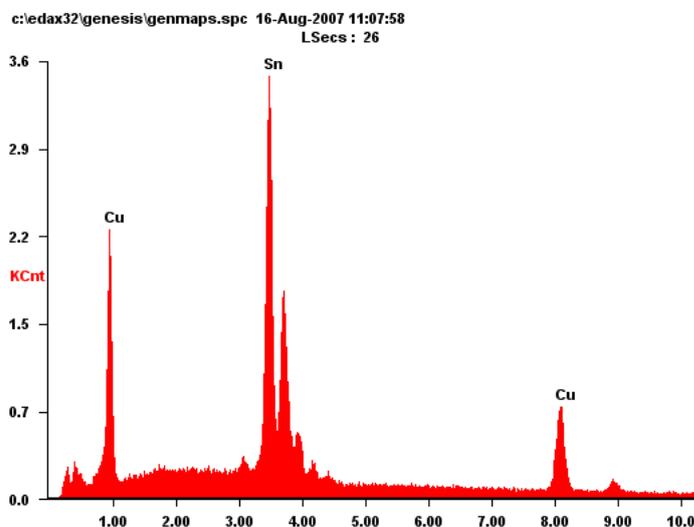
На шлифе можно наблюдать, что в местах контакта олова с медью внутри прослойки есть точки, которые отличаются по цвету и от меди, и от олова, можно предположить, что это соединение.

Для того чтобы подтвердить, что эти частицы являются соединениями, был проведён микрорентгеновский спектральный анализ, с помощью которого был установлен состав вышеуказанных точек. Результат приведён на рис.3.

Установлено, что эта частица состоит из меди и олова, их количественный состав Wt% представлен 60.77% Sn и 39.23% Cu. В соответствии с диаграммой состояния двойных сплавов Sn-Cu эта частица является соединением-фазой η . η – что означает упорядочение атомов в кристаллической решетке соединения при взаимодействии жидкого расплава с другим соединением Cu-Sn - ϵ фаза.[3]

Возможно, при контакте олова с медью появились пустоты из-за загрязнений на поверхности. Слишком крупные пустоты в припое могут создать проблемы надежности, особенно в тех приложениях, где бессвинцовые сборки будут подвергаться циклическим термическим воздействиям. Пустоты могут также уменьшить теплопроводность и увеличить

электрическое сопротивление. Следует также сказать, что небольшие по размеру пустоты могут, в некоторых случаях, наоборот, увеличить надежность, изменяя рисунок потенциальных разломов. Исследования показали, что если пустоты по объему занимают до 25% в соединении, уменьшения надежности не наблюдается. [4]



элемент	Wt%	At%
SnL	60.77	45.33
CuK	39.23	54.67

Рис.2 результат микрорентгеновского спектрального анализа

Заключение

Результаты эксперимента на растяжения показали, что данный бессвинцовый припой пригоден для соединения медных деталей и обладает высоким пределом прочности соединения благодаря добавлению 0,7% Cu для улучшения [смачиваемости поверхности](#).

В припое найдены частицы соединения, таким образом речь идёт о композитном материале, что повышает прочность припоя. По всей видимости, сами соединения получены раньше, ещё при изготовлении припоя, так как мало вероятно, что частицы соединения успели образоваться за время пайки, которое составило 15 секунд.

При контакте олова с медью появились пустоты, по полученным результатам их объем достигает до 23.03% , это не влияет на прочность соединения. В этой связи необходимо экспериментально проверить способы очистки или промывки поверхности перед пайкой.

Установлено, что прочность паяного соединения удовлетворяет требованиям и превышает прочность соединения на основе чистого олова. Также установлено присутствие частиц η фазы в слое припоя. Рекомендован режим пайки: температура 250 °С и выдержка 10 сек.

Литература

1. Вотинцев А. М. Современные материалы для бессвинцовой технологии. Конференция □Подготовка к введению европейских директив RoHS и WEEE□с 30-34
2. Gu Xiao-yan Investigation on the Wettability of Sn-Cu Lead-Free Solder in Electronic Packaging. Semiconductor Technology 2006 Vol.31 No.5 с 337-339
3. Хансен М. Андерко К. Структуры двойных сплавов т.1. М. Металлургия.1970.с 678
4. Петер Биокка, Дефекты бессвинцовой пайки. Производство электроники: технологии, оборудование, материалы. 2005 No 1 с 1-4

ИССЛЕДОВАНИЕ БИОСТРУКТУР ПРИ ПОМОЩИ СТМ

Басецкий О.О., Гарифулина М.Р.

Московский Государственный Технический Университет им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

Аннотация

Перспективным методом детекции денатурированного белка является регистрация нерастворимых полимерных продуктов. Достижения СТМ дают возможность регистрации хода эксперимента с высоким уровнем чувствительности и возможность составить модель процесса по времени. Белковая поверхность может выступать в роли сенсора для системы антитело-антиген.

Abstract

Perspective method of melted protein detection is registration of insoluble polymeric products. STM achievements enable registration of a course of experiment with a high level of sensitivity and an opportunity to make time's model of process. The albuminous surface can act in a role of a sensor control for system an antibody-antigene.

Введение

Нанотехнология открывает качественно новый уровень изучения различных свойств поверхности материалов. Статья посвящена применению СТМ при проведение лабораторных исследований наноструктур: биологических объектов наноуровня. Применение разнообразных методов современной исследовательской работы в области биоматериалов достаточно широко от изучения высокомолекулярных соединений до сканирования клеточных форм. В данной работе предлагается использовать метод сканирующей туннельной микроскопии для исследования поверхности белковых структур.

Научно-технический комплекс УМКА-02-G создан на основе сканирующего туннельного микроскопа. Преимуществом аппарата является возможность получения требуемой атмосферы в рабочей камере (газонаполненная модель).



Рисунок 1 - Умка-02-G ИНАТ

Принцип работы СТМ - это регистрация туннельного тока между проводящим образцом и микроиглой. Микроигла формирует туннельный ток, локализованный на малой площади. Например, если микрозонд удален на фиксированное расстояние от поверхности, то высота физического рельефа в исследуемой точке определит величину туннельного тока. Контролируя при сканировании фиксированную величину туннельного тока за счет вертикального перемещения микрозонда, определяют микрорельеф поверхности.

Исследование биологических молекул методом СТМ

Методика приготовления образца обусловлена невысокой адгезией белковых структур к графиту.

Приготовление белкового образца, для адсорбирования на подложку.

- Подложка - высокоориентированный пирографит, свежий скол непосредственно перед нанесением.
- Буфер для субстрата – фосфорный рН=7,4 с=50 мМ, t=4⁰
- Белковый субстрат растворить в 1 мл буфера, затем довести суммарный объем до 4.
- Поместить в смеситель 230 мкл. раствора и подложку пирографита 5x5 мм.
- В течение часа активно встряхивать, изолировать от атмосферного воздействия.
- После проведения адсорбции промыть буфером и дистиллированной водой, высушить на воздухе.

Главной задачей применения СТМ является исследования топографии макромолекул. Важную роль играет этап выбора подложки и подготовка раствора с наибольшей адгезией системы белок-поверхность, чтобы не происходило смещение молекул сканирующей иглой. При условном разделении белковых молекул на большие и небольшие ставятся различные задачи. Для больших молекул возможно визуализация самих молекул белка (для увеличения адгезии системы необходима дополнительная обработка связывающими веществами). При сканировании небольших белковых молекул возможность визуализации ограничивается лишь обнаружением молекулы на подложке, без топографии поверхности (рисунок 2); в тоже время есть возможность определять изменения системы методом исследования общего поведения коллоидной пленки раствора белка на поверхности подложки (рисунок 3).

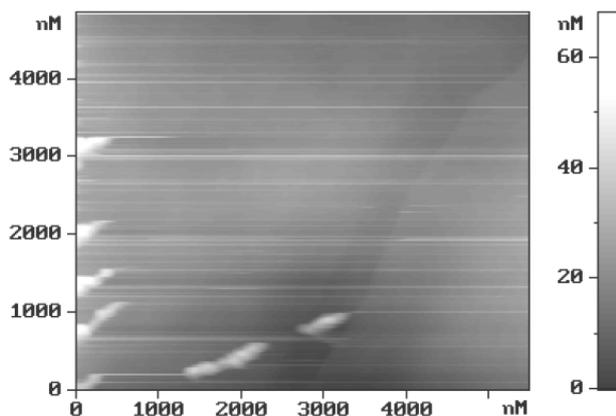


Рисунок 2 - молекула пероксидазы [5]

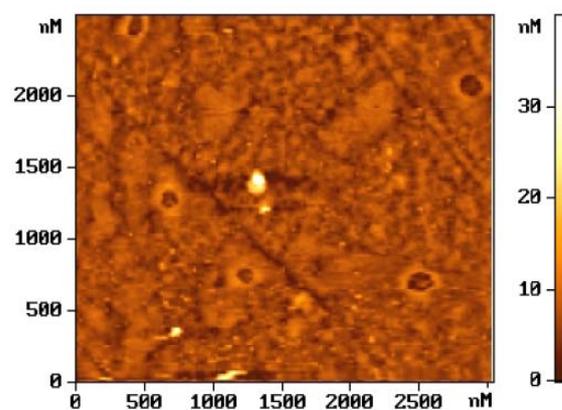


Рисунок 3- изображение полимерного осадка [5]

Использование СТМ для идентификации денатурации белка

Денатурированный белок (denatured protein) - молекула белка, утратившая свои естественные свойства вследствие экстремальных воздействий, что сопровождается потерей его биологической активности. Таким образом, под денатурацией следует понимать нарушение общего плана уникального строения молекулы белка. Внешнее проявление денатурации сводится к потере растворимости, увеличению вязкости раствора, что и возможно наблюдать при туннельном сканировании (рисунок 3).

Основные денатурирующие агенты:

1. Сильные кислоты и щелочи
2. Спирт
3. Соли (ионы) тяжёлых металлов

4. Растворители
5. Специфические соединения

Метод СТМ дает возможность получить модель глобальной структурной перестройки белка с течением времени. Современные исследования в области биохимии указывают на широкую взаимосвязь свойств белка и характеру его денатурации. Высокая скорость образования продуктов реакции при денатурации белка и стабильность системы полимерного осадка, дает возможность использования белков в роли дискретных операторов. Развитие представлений о некремниевых транзисторах в современной технике открывает новые возможности для создания принципиально новых концепции обработки информации. Согласно закону экспоненциального роста производительности процессоров (“Закон Мура”: число транзисторов на кристалле удваивается каждые 18 месяцев). Технология микропроцессоров уже приближается к фундаментальным ограничениям. Следуя закону Мура, к 2010-2020 годам размеры транзистора должны уменьшиться до четырех-пяти атомов. Что невозможно в случае использования традиционных транзисторов. Техническая возможность использования биологических объектов в роли транзисторных сборок видится специалистами как реальная альтернатива существующей технологии. Различные возможности к изменению структур белка требуют конструктивного подхода к решению задачи выбора наиболее оптимальной формы переключения состояний. В форме активного денатурата могут выступать химические соединения-регуляторы образующие комплексные соединения с белком (лиганды). Так же возможно взаимодействие электрическими, магнитными или электро-магнитными полями. Химически настраивая уровень энергии связи, исследователи могут менять чувствительность белков, а значит — их логику взаимодействия с соседями. Группы белков, таким образом, могут составлять процессор, принимающий решения в зависимости от того — превышают ли концентрации лигандов на различных входах пороговые уровни. Профессор Гарвардского медицинского колледжа (Harvard Medical School) Венкатесан Ренугопалакришнан (Venkatesan Renugopalakrishnan) при исследовании белка из мембраны галофильной (обитающей в среде с высокой концентрацией хлорида натрия) бактерии *Halobacterium salinarum*. Особенность этого вещества, называемого бактериородопсином (bR), в том, что оно способно поглощать световую энергию и превращать ее в химическую. Размеры белковых структур дают право утверждать, что система оптического диска, выполненная на подобных соединениях даст прирост в плотности записи.

Заключение

В заключение надо отметить, что технологии подготовки, проведения и анализа эксперимента не являются универсальными, и оптимальный вариант находится эмпирически. Методы СТМ дают возможность исследования прионных белков (особый класс инфекционных агентов) с целью выявления наиболее оптимальных антител и денатуратов для данного типа белка. Так же осуществима возможность выбора наиболее оптимальной сенсорной поверхности для систем антиген-антитело и антиген-денатурат.

Литература

1. А.В.Финкельшеуйн Введение в физику белка курс лекции 1999-2000 гг.
2. Яминский И.В.//Рос.хим.журн.1996, т1., №1.
3. Джонс Э.Л.Грегори Дж. Антитела. Методы. Кн2/под ред.Д.Кэтти: М.: Мир, 1991.
4. Химическая энциклопедия [<http://xumuk.ru>].
5. Электронная библиотека химического факультета МГУ им М.В.Ломоносова [www.msu.ru].