

Можливість застосування топографічного розгляду до границь зерен в нанокремнієвих плівках

М.Г. Находкін, Т.В. Родіонова*

Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
вул. Володимирська, 64/13, 01601 Київ, Україна

(Одержано 12.09.2016, опубліковано online 23.12.2016)

Проведено порівняльний аналіз зернограничної структури нанокремнієвих плівок, що була експериментально досліджена методом атомної силової мікроскопії, з існуючими модельними уявленнями. Показано, що топологічна модель структурних змін може бути застосована для аналізу перетворення зернограничної структури тільки для плівок з рівноосьовою структурою. Для плівок з волокнистою структурою топологічна модель є непринятною внаслідок наявності в плівках великої кількості множинних стиків границь зерен та фасетування границь зерен.

Ключові слова: Нанокремнієві плівки, Зерногранична структура, Атомна силова мікроскопія, Фасетування границь зерен.

DOI: [10.21272/jnep.8\(4\(2\)\).04084](https://doi.org/10.21272/jnep.8(4(2)).04084)

PACS numbers: 68.37.Ps, 68.55._a

1. ВСТУП

Оскільки відомо, що структура полікристалічних плівок визначає їх важливі з точки зору практичних застосувань властивості (механічні, електрофізичні, оптичні), структурним дослідженням приділяється значна увага. При цьому, якщо раніше при дослідженні структури в якості основного структурного елемента розглядали розмір зерен, зараз увага дослідників звернена на такі елементи структури, як дефекти та границі поділу. Зокрема, велика кількість досліджень присвячена вивченню границь зерен та стиків границь зерен в плівках [1, 2], їх будови, орієнтацій них залежностей, зміни характеристик зернограничної структури при термообробках та ін.

Останнім часом поряд з експериментальними дослідженнями значна увага приділяється розробкам теорій та моделей еволюції зерно граничної структури матеріалів [3, 4]. Моделювання дозволяє передбачати зміни мікроструктури та характер розподілу границь зерен при різноманітних впливах, що забезпечить отримання матеріалів із заданими потрібними властивостями. Порівняння структури, що експериментально спостерігається, з модельними уявленнями дозволило би робити висновки щодо механізмів структурних перетворень, які мають місце в плівках. Між тим, такі порівняння, зокрема, для кремнієвих плівок, не проводились. В той же час відомо, що структура плівок визначає важливі для їх практичних застосувань властивості, зокрема, рівномірність розподілу в них легуючих домішок, що визначає стабільність фотогенераційних властивостей плівок та створення ефективних шляхів транспорту носіїв заряду. Тому, з точки зору підвищення ефективності кремнієвих матеріалів, актуальними є дослідження, що спрямовані на вдосконалення структури плівок.

В даній роботі досліджена можливість застосування топографічного розгляду до границь зерен в нанокремнієвих плівках шляхом проведення порівняльного аналізу зернограничної структури плівок, що спостерігається методом атомної силової мікроскопії, з відомими з літератури [3] модельними уявленнями.

стерігається методом атомної силової мікроскопії, з відомими з літератури [3] модельними уявленнями.

2. МЕТОДИКА

Плівки нанокристалічного кремнію одержували методом хімічного осадження з газової фази в реакторі зниженого тиску. Як підкладки використовували пластини монокристалічного кремнію із шаром окисла SiO₂ товщиною ~ 0,1 мкм. Температура осадження дорівнювала 630 °С. Товщина кремнієвих плівок складала 3-100 нм.

При аналізі зернограничної структури нанокремнієвих плівок використовували АСМ-зображення поверхні плівок, які одержували в скануючому атомному силовому мікроскопі NanoScope IIIa у режимі періодичного контакту (Tapping Mode) з використанням кремнієвих зондів з радіусом вістря 10 нм.

3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ОБГОВОРЕННЯ

Отримані з АСМ-зображень характеристики зернограничної структури плівок розглядали в рамках уявлень топологічної моделі [3], яка базується на наступних припущеннях: 1 – низькоенергетичні границі зерен мають, в середньому, меншу площу, ніж границі з високою енергією; 2 – ймовірність високоенергетичної границі зникнути є більшою, ніж низькоенергетичної границі зерен. Для аналізу в рамках даної моделі брали до уваги такі характеристики зернограничної структури нанокремнієвих плівок як конфігурація стиків зерен, величина кутів між границями в стиках, геометрія границь зерен, які контактують в стиках, а також довжину границь між двома стиками зерен та зміну цих характеристик зі зростанням товщини плівок. В моделі [3] вважається, що кривизна границі зерен на двомірному зображенні структури ідентифікується з напрямком руху. Кожна границя між стиками зерен пов'язана з чотирма іншими границями (по дві в кожному потрібному стику) і можливі декілька різних конфігурацій.

* rodtv@univ.kiev.ua

рацій, залежно від кривизни границь, що контактують. В таблиці 1 наведені два основних типа топологій, які мають місце в полікристалах [3, 4], і спостерігалися нами в нанокремнієвих плівках.

У випадку, коли всі чотири границі зерен є вогнутими, можна вважати, що обидва потрійних стики будуть рухатися назустріч один одному і що довжина границі між ними буде скорочуватись (зникаюча границя). Якщо всі чотири границі є випуклі, обидва потрійних стики будуть рухатися геть один від одного і границя між ними буде збільшуватися в довжину (зростаюча границя). Можливі змішані випадки, коли частина границь є вогнутими, а частина – випуклими. Такі топологічні ситуації є невизначеними (невизначені границі). Таким чином, виходячи з кривизни границь зерен, що контактують в стиках, кожна границя зерен (між стиками) може бути класифікована як зникаюча, зростаюча, або невизначена.

Таблиця 1 – Основні типи топологій границь зерен та стиків границь зерен

АСМ-зображення границь зерен*	Тип границі	Схематичне зображення границі
	зникаюча границя	
	зростаюча границя	

* – стрілки на АСМ-зображеннях вказують напрямок руху потрійних стиків (назустріч один одному, або геть один від другого).

Як було відмічено раніше [5], нанокремнієві плівки характеризуються рівноосьовою структурою, якщо їх товщина ≤ 70 нм, та волокнистою при більших товщинах. На рис. 1 для обох типів структур плівок наведено розподіли для зникаючих, невизначених та зростаючих границь зерен. Видно, що у випадку рівноосьової структури (рис. 1, а) значна кількість границь зерен, що розташовані між потрійними стиками, є зростаючими. Частина стиків може бути віднесена до невизначених, а найменша частина – до зникаючих.

В той же час, як видно з рис. 1, б, в плівках з волокнистою структурою більшість границь між потрійними стиками належить до невизначених, а кількість зникаючих границь значно більша, ніж у рівноосьовій структурі. Зростаючих границь мало.

Якщо порівняти плівки з рівноосьовою структурою, але з різною товщиною, то, як видно з рис. 2, співвідношення в кількості типів границь для плівок товщиною 10 нм та 50 нм різне. Зі зростанням товщини плівок зменшується кількість високоенергетичних (зникаючих) границь та зростає кількість границь, що зростають (низькоенергетичних), як і передбачено в моделі [3].

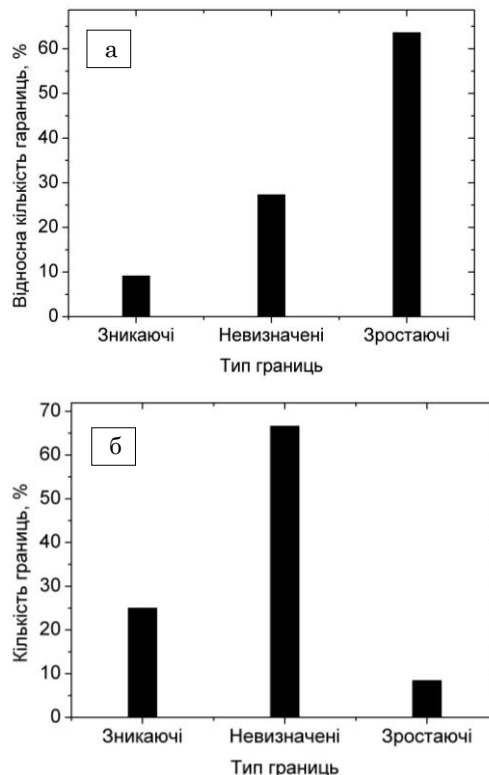


Рис. 1 – Розподіли для зникаючих, невизначених та зростаючих типів границь зерен у нанокремнієвих плівках з рівноосьовою (а) та волокнистою (б) структурою

На рис. 3 наведено співвідношення відстані між суміжними потрійними стиками та товщиною нанокремнієвих плівок. Видно, що при збільшенні товщини від 100 нм до 850 нм довжина низькоенергетичних границь зменшується, а високоенергетичних – збільшується. Значний ріст довжини обох типів границь пов'язано зі значним збільшенням розмірів зерен в плівках при перетворенні рівноосьової структури в волокнисту [5].

Отримані для нанокремнієвих плівок дані суттєво відрізняються від результатів, що наведені в роботі [3] для алюмо-ітриєвого гранату (YAG). В даному матеріалі при відпалюванні має місце перетворення симетричного розподілу типів зернограничних топологій до асиметричного, що обумовлено формуванням великої кількості низькоенергетичних границь. В нанокремнієвих плівках схожі зміни спостерігаються тільки в інтервалі товщин плівок 10-50 нм, тобто поки структура плівок залишається рівноосьовою. Але повної подібності в механізмах процесів, що відбуваються в матеріалах, нема. В цьому інтервалі товщин, як встановлено [5], значного росту зерен в нанокремнієвих плівках не спостерігається, на відміну від випадку, що описаний в роботі [3] для росту зерен в YAG при відпалюванні.

Перехід до волокнистого типу структури в нанокремнієвих плівках супроводжується формуванням в плівках великої кількості двійникових границь [6] та множинних (4-х та більше) стиків границь зерен [7], що відображається на топології границь та стиків границь зерен. Приклади характерних зернограничних топологій, що спостерігаються в волокнистих плівках, наведені в таблиці 2.

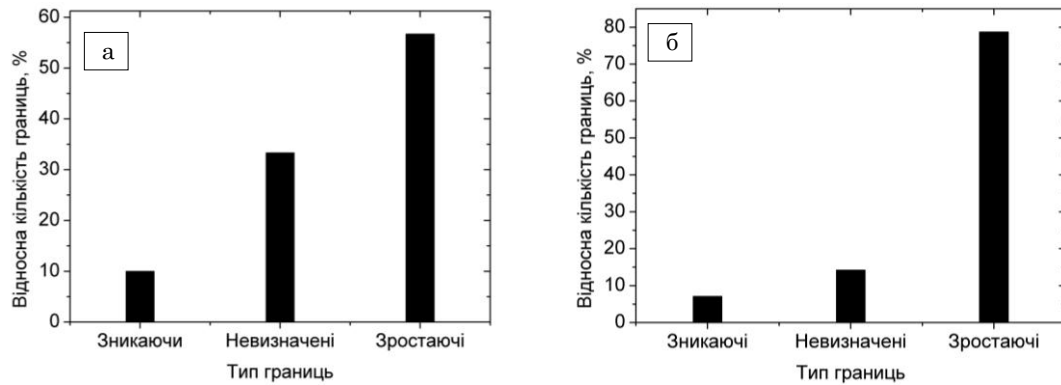


Рис. 2 – Розподіли для зникаючих, невизначених та зростаючих типів границь зерен у нанокремнієвих плівках з рівноосьовою структурою товщиною 10 нм (а) та 50 нм (б)

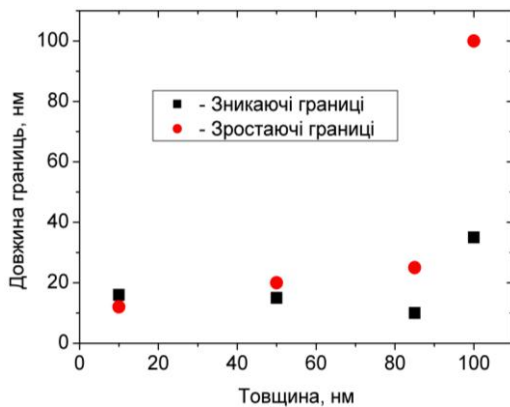


Рис. 2 – Співвідношення відстані між суміжними потрійними стиками та товщиною нанокремнієвих плівок

Таблиця 2 – Приклади зерно границь топологій в кремнієвих плівках

АСМ-зображення границь зерен*	Тип границь	Схематичне зображення зерно границьної топології
	Множинний стик зерен	

	Прямолінійні границь зерен	
	Фасетована границь зерен	

В волокнистій структурі більшість границь зерен, що перетинаються в стиках, є прямолінійними, тому до них неможливо застосовувати геометричну модель вогнутих та випуклих границь зерен. Крім того, в плівках з волокнистою структурою має місце фасетування границь зерен, що також утруднює застосування топографічної моделі.

4. ВИСНОВКИ

Топологічна модель структурних змін може бути застосована для аналізу перетворення зернограницьної структури нанокремнієвих плівок тільки в інтервалі товщин плівок ≤ 70 нм, при яких структура плівок є рівноосьовою.

Для плівок з волокнистою структурою топологічна модель є неприйнятною внаслідок наявності в плівках великої кількості множинних стиків границь зерен та фасетування границь зерен.

Возможность применения топологического рассмотрения к границам зерен в нанокремниевых пленках

Н.Г. Находкин, Т.В. Родионова

Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко,
ул. Владимирская, 64/13, 01601 Киев, Украина

Проведен сравнительный анализ зернограницьної структури нанокремнієвих плівок, експериментально наблюдаемой методом атомной силовой микроскопии, с существующими модельными представлениями. Показано, что топологическая модель структурных изменений может применяться для анализа преобразований зернограницьної структури только для пленок с равноосной структурой. Для пленок с волокнистой структурой топологическая модель неприемлема из-за наличия в пленках большого количества множественных стыков границ зерен и фасетирования границ зерен.

Ключевые слова: Нанокремнієві плівки, Зернограницьна структура, Атомна силовая микроскопия, Фасетирование границь зерен.

Possibility of Application of Topological Consideration for Grain Boundaries in Nanosilicon Films

N.G. Nakhodkin, T.V. Rodionova

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 64/13, Volodymyrska st., 01601 Kyiv, Ukraine

A comparative analysis of the experimentally observed by atomic force microscopy grain boundary structure of nanosilicon films with the existing model representations was carried out. It is shown that the topological model of structural changes may be used for the analysis of changes of grain boundary structure only for films with equiaxial structure. For films with fibrous structure topological model is unacceptable because of the large number of multiple joints grain boundaries and grain boundaries faceting.

Keywords: Nanosilicon films, Grain boundary structure, Atomic force microscopy, Grain boundary faceting.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. H.-Yu. Mao, S.-Yu. Lo, D.-S. Wu, B.-R. Wu, S.-L. Ou, H.-Yu Hsieh, R.-H. Horng, *Thin Solid Films* **520**, 5200 (2012).
2. S. Mukhopadhyay, A. Chowdhury, S. Ray, *Thin Solid Films* **516**, 6824 (2008).
3. S.J. Dillon, G.S. Rohrer, *Acta Materialia* **57**, 1 (2009).
4. M. Upmanyu, G.N. Hassold, A. Kazaryan, E.A. Holm, Y. Wang, B. Patton, D.J. Srolovitz, *Interface Sci.* **10**, 201 (2002).
5. N.G. Nakhodkin, T.V. Rodionova, A.S. Sutyagina, *Ukr. J. Phys.* **60** No 2, 165 (2015).
6. N.G. Nakhodkin, T.V. Rodionova, *phys. status solidi a* **123**, 81 (1991).
7. N.G. Nakhodkin, N.P. Kulish, T.V. Rodionova, A.S. Sutyagina, *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv Ser. Radio Physics & Electronics* No 1/2(21/22), 83 (2014).