

06

## Физические основы формирования гетероваризонной структуры на основе кремния

© М.К. Бахадирханов, С.Б. Исамов

Ташкентский государственный технический университет,  
100095 Ташкент, Узбекистан  
e-mail: bahazeb@yandex.ru

Поступило в Редакцию 15 марта 2021 г.

В окончательной редакции 23 апреля 2021 г.

Принято к публикации 28 мая 2021 г.

С формированием бинарных элементарных ячеек на основе элементов  $A^{II}$  и  $B^{VI}$ ,  $A^{III}$  и  $B^V$  в приповерхностной области кремния была получена гетероваризонная структура, не разрушающая кристаллическую структуру, без поверхностных состояний толщиной около  $5\ \mu\text{m}$ . Полученная гетероваризонная структура обладает особыми фундаментальными параметрами, обеспечивающими поглощение света в широком интервале солнечного спектра от УФ до ИК излучения с  $\lambda = 0.1\text{--}3\ \mu\text{m}$ , т.е. охватывает весь спектр Солнца.

**Ключевые слова:** кремний, фотоэлемент, солнечный элемент, гетероваризонная структура, фотовольтаика, соединения  $A^{II}$  и  $B^{VI}$ ,  $A^{III}$  и  $B^V$ .

DOI: 10.21883/JTF.2021.11.51528.60-21

### Введение

Благодаря именно кремнию современная электроника достигла очень больших успехов. Все это связано с достаточно большими запасами кремния на земном шаре, а самое главное освоена доступная технология получения кремневых кристаллов с необходимой чистотой и электрическими параметрами и заданными размерами монокристаллов. Ни для одного полупроводникового материалов ближайшее время не будет разработана технология получения кристаллов такой чистоты и с такими геометрическими размерами.

Фотоэнергетика может стать основным источником энергии для человечества не только в далеком будущем, но и в ближайшее время, так как это самый чистый и вечный источник энергии. В настоящее время в фотоэнергетике кремний был и остается основным материалом, более 90% фотоэлектрических станций работают на основе кремневых фотоэлементов. Однако широко-масштабное использование кремневых фотоэлементов в фотоэнергетике в наземных условиях ограничено их низким КПД, которое достигло в промышленности 20%, а в лабораторных условиях 25% [1–3].

Фотоэлементы на основе полупроводниковых соединений  $A^{III}B^V$  и  $A^{II}B^{VI}$  хоть и имеют достаточно высокий КПД, особенно многокаскадные фотоэлементы [4–5], но они не могут быть использованы как источник энергии в наземных условиях, т.е. практически не возможно использовать такие фотоэлементы в более широком масштабе. Это связано не только с очень высокой ценой таких фотоэлементов (они почти в 50 раз дороже, чем фотоэлементы на основе кремния), но и с ограниченным запасом элементов в составе полупроводников  $A^{III}B^V$  и  $A^{II}B^{VI}$ , их токсичностью, а также слишком сложной технологией получения таких элементов [6–8].

Поэтому единственным выходом остается повышение КПД фотоэлементов на основе кремния или разработка нового класса материала на его основе для будущего фотоэнергетики в наземных условиях.

Более глубокий анализ показывает, что низкое значение КПД кремневых солнечных элементов в основном связано с фундаментальными параметрами этого материала, т.е. небольшой шириной запрещенной зоны, не прямозонной структурой, не высоким значением подвижности по сравнению с полупроводниковыми соединениями  $A^{III}B^V$  [9].

Поэтому можно однозначно утверждать, что без изменения фундаментальных параметров кремния практически невозможно создать более эффективные фотоэлементы [10,11].

Насколько нам известно, в настоящее время не существуют какие-либо физические материалы и технологии, позволяющие изменить фундаментальные параметры кремния, а также разработать какую-либо технологию получения новых перспективных материалов для будущего фотоэнергетики.

Целью настоящей работы являлось физическое обоснование возможности создания нового типа гетероваризонных структур за счет формирования бинарных кластеров атомов III и V групп в решетке кремния, а также раскрытие новых физических и функциональных возможностей такого материала для оптоэлектроники и фотоэнергетики.

### 1. Физические основы формирования бинарных элементарных ячеек в решетке кремния

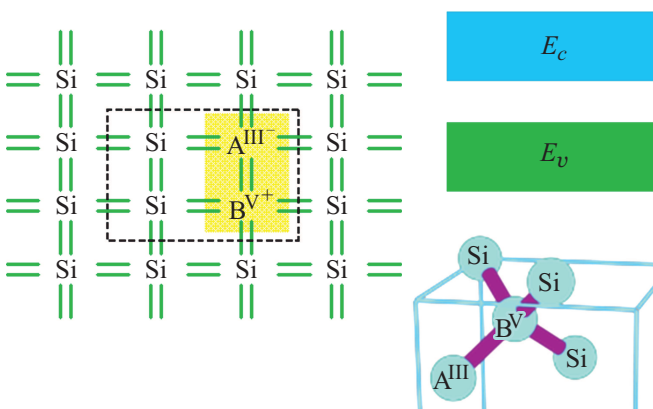
В последние 10–15 лет ученые кафедры „Цифровая электроника и микроэлектроника“ ТГТУ занимаются

возможностью управления фундаментальными параметрами кремния [12–14]. Ученым этой кафедры удалось физически обосновать оригинальную и доступную технологию получения кремния с управляемыми фундаментальными параметрами. Суть данного технологического решения заключается в формировании в решетке кремния бинарных нанокластеров, т.е. бинарных элементарных ячеек с управляемыми параметрами.

Как известно, элементы III и V групп в кремнии в основном находятся в узлах подрешетки и создают в запрещенной зоне кремния мелкие донорные и акцепторные энергетические уровни. Растворимость этих элементов в кремнии имеет достаточно высокое значение и достигает  $N \geq 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ . В атомарном состоянии они находятся в виде однократно заряженных ионов  $A^{III-}$ ,  $B^{V+}$  и вокруг себя создают электрический потенциал, также они создают соответствующую дополнительную концентрацию носителей заряда как в зоне проводимости, так и валентной зоне. Все это приводит к существенному нарушению термодинамически равновесного состояния кристалла. Поэтому кристалл в таких условиях находится в термодинамически неравновесном состоянии [15].

Установлено, что можно создать такие термодинамические условия диффузионного легирования кремния, последовательно элементами III и V групп, а также оптимальные термодинамические условия термоотжига, после диффузионного легирования, позволяющего находиться атомам III и V групп в решетке кремния рядом, т.е. они будут занимать места в соседних узлах решетки (рис. 1).

Как видно, при этом формируются электронейтральные молекулы между ионами  $A^{III-}$  и  $B^{V+}$ . Формирование таких молекул полностью экранирует электрический потенциал каждого иона атомов III и V группы. При этом атомы III и V групп в кремнии действуют не как примесные атомы, а как основные атомы новой элементарной ячейки. Поэтому атомы III и V групп не создают энергетические уровни в запрещенной зоне, т.е. наличие их не создает дополнительные электроны и дырки как в зоне проводимости, так и валентной зоне. Формирование



**Рис. 1.** Электронейтральные молекулы между ионами  $A^{III-}$  и  $B^{V+}$  и формирование новых элементарных ячеек  $Si_2A^{III}B^V$  в кремнии.

таких молекул не нарушает тетраэдрическую связь в решетке кремния. Это означает, что формирование таких электронейтральных молекул между ионами элементов III и V групп обеспечивает более выгодное термодинамическое равновесное состояние решетки. Это приводит к существенному стимулированию самоорганизации формирования таких электронейтральных молекул между ионами элементов  $A^{III}$  и  $B^V$ .

Формирование таких электронейтральных молекул интересно тем, что при этом в решетке кремния появляется новая элементарная ячейка  $Si_2A^{III}B^V$  (рис. 1). Эти элементарные ячейки в отличие от элементарной ячейки кремния, которая имеет 100% ковалентную связь, обладают частично ионно-ковалентной связью, т.е. появляется элементарная ячейка, не существующая в природе. Ионная доля в таких новых бинарных элементарных ячейках  $Si_2A^{III}B^V$ , согласно [15,16], определяется разностью значений электроотрицательности атомов III и V групп. Расчеты показывают, что при значении разности электроотрицательности в пределах  $\Delta\chi \leq 1$  доля ионной связи в них составляет около 15–20%. Это означает, что при этом ковалентная связь в них будет преобладающей.

Теперь возникает вопрос все ли атомы элементов III и V групп могут образовывать электронейтральные молекулы и будут ли формировать новые бинарные элементарные ячейки в решетке кремния? Теоретически да, но при этом для этого необходимо чтобы выполнялись следующие условия [17,18].

1. Сумма ковалентных радиусов атомов элементов III ( $r_{III}$ ) и V ( $r_V$ ) групп должна быть достаточно близка к сумме ковалентных радиусов двух атомов кремния ( $r_{Si}$ ), т.е. должны выполняться следующие соотношения:  $r_{III} + r_V - 2r_{Si} \leq \pm 0.2r_{Si}$ ,  $2r_{Si} - (r_{III} + r_V) \leq \pm 0.2(2r_{Si})$ .

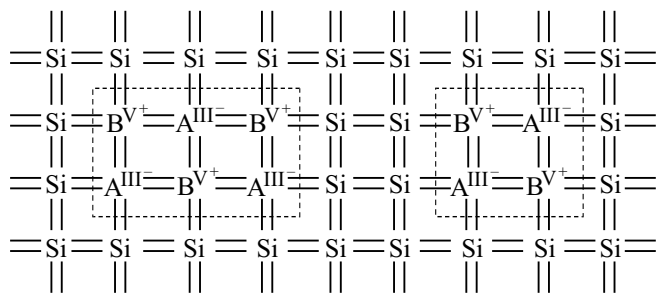
2. Разность значений электроотрицательности атомов элементов III и V групп не должна существенно отличаться от значений электроотрицательности атомов в кремнии.

3. Растворимость атомов элементов III и V групп и их коэффициенты диффузии не должны сильно отличаться друг от друга.

4. Необходимо проведение термоотжига после диффузионного легирования материала. Термодинамические условия термоотжига (температура и время) в основном определяются химическими и физическими параметрами элементов III и V групп.

На основе анализа электрических и химических параметров элементов III и V групп, а также их коэффициентов диффузии и растворимости в кремнии установлены следующие группы пар элементов III и V групп. Эти данные показывают возможность формирования достаточно широкого класса бинарных элементарных ячеек с участием атомов III и V групп.

1. Наиболее подходящие пары — BBi, AlP, GaP, BP.
2. Подходящие пары — BSb, AlAs, GaAs.
3. Возможные пары — BAs, GaSb, InP.
4. Не подходящие пары — AlSb, InAs, InSb.



**Рис. 2.** Некоторые возможные комбинации бинарных элементарных ячеек в решетке кремния.

Как известно, фундаментальные параметры каждого полупроводникового материала определяются его структурой, составом и химической связью элементарных ячеек, из которых состоит полупроводниковый материал. Поэтому необходимо выбрать оптимальные условия диффузионной технологии легирования кремния атомами элементов III и V групп, позволяющую вводить с максимальной и одинаковой концентрацией, а также распределять эти атомы в образцах кремния с учетом их коэффициентов диффузии как в процессе одновременной, так и последовательной диффузии элементов III и V групп. Т.е. необходимо определить оптимальные температуры и время дополнительного термоотжига, обеспечивающее максимальное участие введенных примесных атомов в формировании электронейтральных молекул.

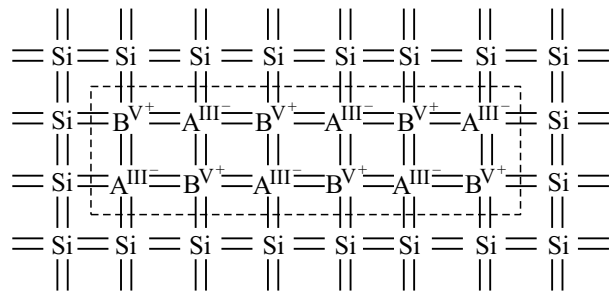
С повышением концентраций введенных атомов элементов III и V групп существенно увеличивается вероятность формирования электронейтральных атомов между атомами элементов III и V групп, следовательно, увеличивается концентрация бинарных элементарных ячеек, а это в свою очередь приводит к появлению некоторых возможных комбинаций бинарных элементарных ячеек (рис. 2).

Энергетические связи атомов в элементарных ячейках и их комбинации будут существенно отличаться друг от друга. Это означает, что необходимая энергия для освобождения электронов в таких элементарных ячейках с различными их комбинациями существенно отличается, т.е. будут существенно различные значения ширины запрещенной зоны. Поэтому в них не будет одинакового фиксированного значения длины волны света для фундаментального поглощения ( $\lambda_b$ ), каждая из них будет иметь свои значения  $\lambda_b$ , т.е. существенно расширяется спектр фундаментального поглощения кремния. Спектр поглощения будет заметнее только при достаточно высокой концентрации таких элементарных ячеек и их комбинаций.

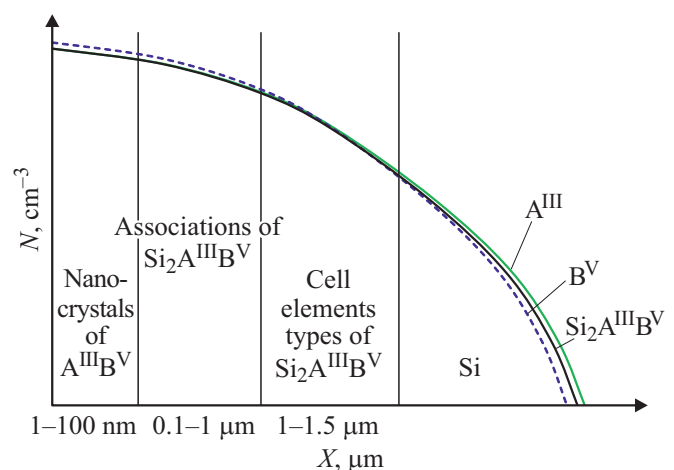
При введении максимальной концентрации примесных атомов III и V групп  $N \geq 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  в кремний, обеспечивающее их одинаковое концентрационное распределение, в отличие от выше указанных различных комбинаций бинарных элементарных ячеек могут формироваться нанокристаллы полупроводникового соединения

на основе введенных примесных атомов элементов III и V групп (рис. 3). Это означает, что появляется локальная область, обогащенная нанокристаллами атомов полупроводниковых соединений  $A^{III}B^V$ , погруженная в решетку кремния. Размер нанокристаллов полупроводниковых соединений  $A^{III}B^V$  может изменяться от нескольких нанометров до нескольких десятков нанометров в зависимости от условий легирования. Энергетическая структура кремния с высокой концентрацией бинарных элементарных ячеек и таких структур существенно меняется, и кремний превращается в новый материал.

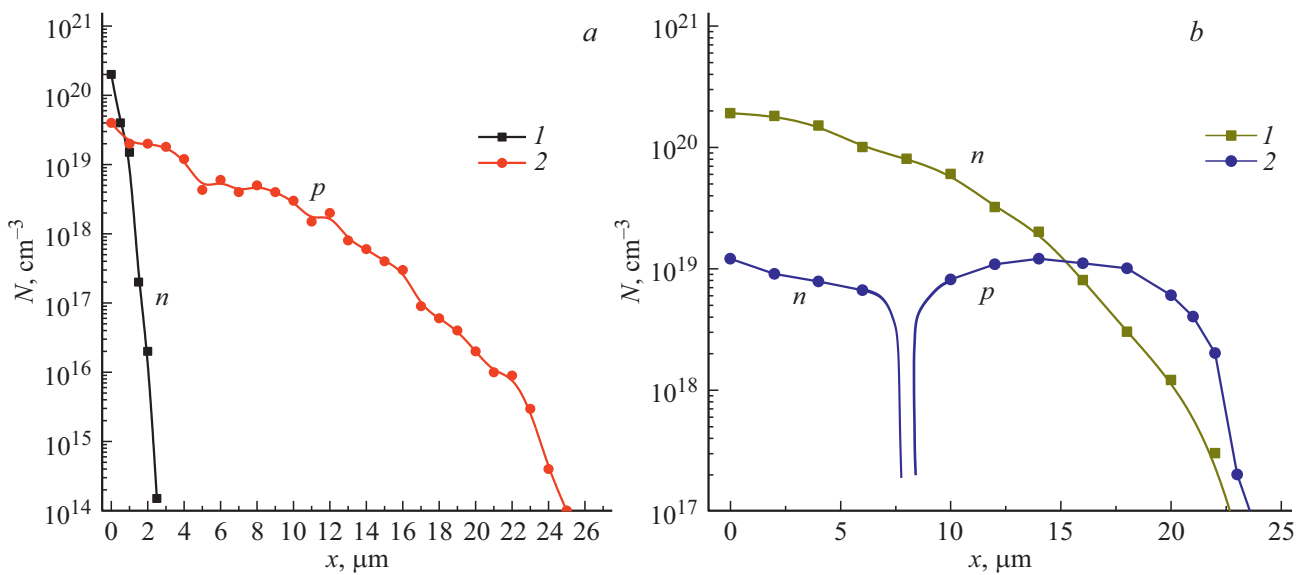
Наиболее вероятные структуры на основе распределения элементарных ячеек по глубине кремния  $Si_2A^{III}B^V$  представлены на рис. 4. Как видно в приповерхностной области толщиной  $d = 1-100 \text{ nm}$ , появляется область, обогащенная нанокристаллами с различным размером. Дальше от  $0.1$  до  $1 \mu\text{m}$  появляется область, обогащенная различными комбинациями бинарных элементарных ячеек. После этой области существует область, обогащенная в основном отдельными элементарными ячейками  $d = 1-1.5 \mu\text{m}$ , затем



**Рис. 3.** Нанокристаллы полупроводникового соединения на основе элементов III и V групп в решетке кремния ( $Si_2A^{III}B^V$ ).



**Рис. 4.** Наиболее вероятные структуры на основе распределения элементарных ячеек по глубине кремния.  $A^{III}$  — концентрационное распределение элементов III группы после диффузии элементов V группы (первая стадия диффузии),  $B^V$  — концентрационное распределение элементов V группы (вторая стадия диффузии),  $Si_2A^{III}B^V$  — концентрационное распределение бинарных элементарных ячеек в решетке кремния.



**Рис. 5.** Концентрационное распределение электронов (атомов фосфора) и дырок (галлия) в решетке кремния: *a* — диффундированных независимо друг от друга, *b* — при последовательной диффузии. Кривая 1 — распределение электронов (фосфора). Кривая 2 — распределение дырок (галлия).

до  $d = 1.5-3 \mu\text{m}$  следует область кремния с наименьшей концентрацией бинарных элементарных ячеек.

Толщиной каждой области и их распределением можно управлять в широком интервале в зависимости от условий диффузии. Таким образом, из рис. 5 видно, что в кремнии, начиная от поверхности до глубины  $X$ , появляется область, в которой структура, состав и химические связи меняются от полупроводниковых соединений  $A^{III}B^V$  до чистого кремния без существенного изменения кристаллической структуры кремния и тетраэдрической связи, но естественно свойства каждой структуры различаются, и они существенно отличаются фундаментальными параметрами друг от друга.

Эта структура не похожа на существующие варизонные структуры и не похожа на гетероструктуру, т. е. возникает структура нового типа — гетероаризонная структура без всяких нарушений структуры и поверхностных состояний. Это структура создается с помощью диффузионной технологии, так как здесь применяется диффузионный способ формирования структур.

Для доказательства формирования таких гетероаризонных структур были проведены предварительные эксперименты с участием примесных атомов галлия и фосфора, входящих в ряд более подходящих пар. В качестве исходного материала был использован монокристаллический кремний КЭФ-100 ( $N_P \sim 10^{13} \text{cm}^{-3}$ ) с содержанием кислорода  $N_{O_2} \approx (5-6) \cdot 10^{17} \text{cm}^{-3}$  и плотностью дислокаций  $N_D \sim 10^3 \text{cm}^{-2}$ . Размер образцов составлял  $V \sim 1 \times 4 \times 8 \text{mm}$ . После необходимых механических и химических обработок образцов проводилась диффузия фосфора из нанесенного слоя фосфорнокислого аммония на воздухе при  $T = 1000^\circ\text{C}$  в течение  $t = 2 \text{h}$ . После диффузии во всех образцах снималось с поверхности фосфоросиликатное стекло методом трав-

ления с  $\text{HF}$  и  $\text{NH}_4\text{F}$ . Концентрации атомов фосфора и галлия исследовались 4-х зондовым методом. При этом предполагалось, что эти атомы находятся в решетке в электроактивном состоянии. Наряду с этим учитывались зависимости подвижности носителей заряда от концентрации примесных атомов. При этом концентрация электронов (фосфора) на поверхности образцов составляла  $N_P = 2 \cdot 10^{20} \text{cm}^{-3}$ .

Диффузия галлия в кремнии (КЭФ 100) проводилась из газовой фазы при температуре  $T = 1250^\circ\text{C}$  в течение 4 h. Такой выбор диффузии галлия дает возможность получить максимальную концентрацию на поверхности и в объеме кремния.

Затем в образцах, легированных фосфором, проводилась диффузия галлия при  $T = 1250^\circ\text{C}$  в течение 4 h. При этом одновременно подвергались термоотжигу образцы кремния, легированного фосфором (без галлия), также при  $T = 1250^\circ\text{C}$ ,  $t = 4 \text{h}$ , чтобы определить изменения концентрационного распределения фосфора при дополнительных отжигах.

На рис. 5, *a* представлено концентрационное распределение атомов фосфора в кремнии после диффузии  $T = 1000^\circ\text{C}$ ,  $t = 2 \text{h}$ . Также представлено концентрационное распределение галлия после диффузии  $T = 1250^\circ\text{C}$ ,  $t = 4 \text{h}$  в образцах КЭФ-100.

Как видно из экспериментальных результатов, концентрация фосфора в приповерхностной области составляет  $N_P = 2 \cdot 10^{20} \text{cm}^{-3}$ , при этом на глубине  $x = 2.5 \mu\text{m}$ , его концентрация уменьшена до  $\sim 10^{14} \text{cm}^{-3}$  (кривая 1) при этом образцы все время остаются *n*-типом.

Полученные данные соответствуют литературным данным [12–14]. Как видно из рисунка, концентрационное распределение фосфора и галлия при их диффузии по отдельности существенно отличаются друг от друга.

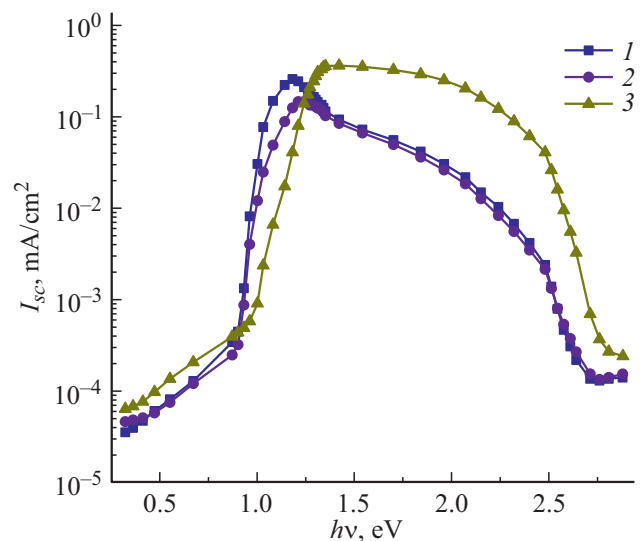
На рис. 5, *b* представлено концентрационное распределение электронов (фосфора) в контрольных образцах, которые подвергались дополнительному термоотжигу при  $T = 1250^\circ\text{C}$ ,  $t = 4\text{ h}$  (кривая 1), а также концентрационное распределение носителей заряда в образцах кремния, легированного галлием, при  $T = 1250^\circ\text{C}$ ,  $t = 4\text{ h}$ , которые были предварительно легированы фосфором при  $1000^\circ\text{C}$ ,  $t = 2\text{ h}$  (кривая 2). Как видно в результате дополнительного отжига, при  $T = 1250^\circ\text{C}$ ,  $t = 4\text{ h}$  поверхностная концентрация фосфора незначительно уменьшается, а глубина проникновения достигает  $x = 25\ \mu\text{m}$  (кривая 1), в области  $x = 0-25\ \mu\text{m}$  образцы приобретают явно *n*-тип.

Концентрационное распределение в образцах легированных галлием при  $T = 1250^\circ\text{C}$ ,  $t = 4\text{ h}$ , после легирования фосфором при  $1000^\circ\text{C}$ ,  $t = 2\text{ h}$  (рис. 5, *b*, кривая 2) показывает, что в исследуемых образцах до глубины  $x = 7.5-8\ \mu\text{m}$  имеется *n*-тип проводимости. При этом концентрация электронов (фосфора) существенно уменьшается, а при  $x > 7.5-8\ \mu\text{m}$  образцы приобретают *p*-тип проводимости. В области  $x = 7.5-10\ \mu\text{m}$ , концентрация дырок незначительно увеличивается, а в области  $x = 8-15\ \mu\text{m}$  концентрация дырок (галлия) практически остается постоянной, а при  $x > 17\ \mu\text{m}$  достаточно резко уменьшается.

Эти полученные результаты показывают, что при диффузии галлия (при наличии высокой концентрации фосфора), концентрация фосфора в области  $x = 0-7.5\ \mu\text{m}$  уменьшается на 1.5–1 порядок, затем концентрация галлия становится больше чем фосфора и материал обладает *p*-типом проводимостью. Хотя как видно из рис. 5, *b* (кривая 1) концентрация фосфора до области  $15\ \mu\text{m}$  больше, чем концентрация галлия. Эти результаты дают возможность предполагать, что наличие фосфора в кремнии приводит к повышению концентрации галлия.

## 2. Обсуждение

Полученные экспериментальные результаты невозможно объяснить взаимной компенсацией донорных (фосфор) и акцепторных (галлий) примесных атомов, так как атомы фосфора и галлия в решетке кремния распределены хаотически и пространственно разделены, что соответственно не должно приводить к повышению концентрации атомов галлия при наличии атомов фосфора. Поэтому можно предлагать, что эти явления связаны с взаимодействием атомов фосфора и галлия. Поскольку атомы фосфора в решетке кремния находятся в узлах кристаллической решетки в виде положительно заряженных ионов  $\text{P}^+$ , создавая дополнительные электроны в зоне проводимости, концентрация которых равна  $N_{\text{P}^+} = n$ . Наличие достаточно большой концентрации положительно заряженных атомов фосфора ( $\text{P}^+$ ) создает значительный электрический потенциал. Этот потенциал распределен от поверхности кристалла вглубь образца кремния, что стимулирует повышение



**Рис. 6.** Спектральная зависимость тока короткого замыкания образцов кремния с *p-n*-переходом, полученным с помощью: 1 — P, 2 — Ga и 3 — GaP.

концентрации атомов галлия в процессе диффузии, которые в кремнии действуют как акцепторная примесь в виде отрицательных ионов  $\text{Ga}^-$  [19,20]. Поэтому можно предполагать, что в результате таких взаимодействий в решетке кремния появляются донорно-акцепторные комплексы, т.е. квазимолекулы в виде  $[\text{P}^+\text{Ga}^-]$ . В свою очередь, квазимолекулы  $[\text{P}^+\text{Ga}^-]$  в решетке кремния и их распределение по глубине образуют гетероваризонную структуру, которые изменяют энергетическую структуру кремния.

Для оценки вклада в энергетические параметры кремния с гетероваризонными структурами на основе  $[\text{P}^+\text{Ga}^-]$  мы создали *p-n*-переходы в кремнии с участием примесных атомов галлия и фосфора по отдельности, и с гетероваризонными структурами. При этом в качестве исходного материала был использован монокристаллический кремний дырочного типа проводимости легированный бором марки КДБ-0.5 (для легирования фосфором) и монокристаллический кремний электронного типа проводимости легированный фосфором марки КЭФ-0.3 (для легирования галлием), гетероваризонная структура создавалась на основе кремния КДБ-0.5. Диффузия во всех образцах была проведена при одинаковых условиях  $T = 1250^\circ\text{C}$ ,  $t = 0.5\text{ h}$ .

Результаты эксперимента (рис. 6) показывают, что в *p-n*-переходах, образованных галлием и фосфором, их спектральные зависимости тока короткого замыкания ( $I_{sc}$ ) соответствуют друг другу. В случае сформированной квазимолекулы  $\text{Ga}^-\text{P}^+$  в кремнии  $I_{sc}(h\nu)$  существенно отличается от легированного фосфором и галлием в отдельности.

1) Максимальное значение  $I_{sc}$  в образцах с квазимолекулами  $\text{Ga}^-\text{P}^+$  наблюдается не при  $h\nu = 1.1\text{ eV}$ , а при  $h\nu = 1.35\text{ eV}$ ;

2) при этом наблюдаются существенно повышенные значения  $I_{sc}$  в области  $h\nu = 1.3-2.8$  eV;

3) имеет место расширение спектральной области чувствительности  $I_{sc}$ .

Полученные результаты позволяют предполагать, что такие существенные отличия  $I_{sc}(h\nu)$  связаны с формированием бинарных элементарных ячеек  $\text{Si}_2\text{GaP}$ , в результате которых создается гетероваризонная структура на основе кремния. Так как формирование квазимолекулы  $[\text{GaP}]$  в решетке кремния не создает никаких энергетических уровней в запрещенной зоне кремния. Это также может служить доказательством формирования гетероваризонных структур с учетом галлия и фосфора в кремнии. Более достоверные данные могут дать результаты рентгеноструктурных и масс-спектроскопических анализов, над чем работают в настоящее время авторы.

Рассмотрим энергетическую структуру полученного материала в зависимости от природы введенных примесных атомов элементов III и V групп, где формируются нанокристаллы полупроводниковых соединений  $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$  с большими значениями энергии ширины запрещенной зоны как у GaP, BP, GaAs, а также с малыми значениями как у GaSb, InSb и др. Это позволяет создать различные комбинации бинарных элементарных ячеек, т.е. получить структуру на глубине  $d = 0.1-5 \mu\text{m}$  в кремнии с энергетической структурой, отличной от энергетической структуры полупроводниковых соединений  $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ . А также с изменяющейся шириной запрещенной зоны начиная от GaP, GaAs, BP до ширины запрещенной зоны кремния  $E_g = 1.12$  eV, что обеспечивает максимальное поглощение УФ, видимой и ИК области светового излучения. Также формирование таких структур в приповерхностной области материала может образовывать соединения с запрещенной зоной меньше чем запрещенная зона кремния (GaSb, InAs, InSb), в которой значение  $E_g$  от поверхности кристалла непрерывно увеличивается до  $E_g$  кремния на глубине  $d$ . В этом случае создается материал поглощающий ИК излучение с  $\lambda > 1.2 \mu\text{m}$ . При этом необходимо отметить, что ширина запрещенной зоны нанокристаллов  $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$  и различных комбинаций бинарных элементарных ячеек может отличаться от ширины запрещенной зоны как самих соединений  $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ , так и нанокристаллов  $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ , находящихся в кристаллической решетке кремния.

Таким образом, оптимальные условия легирования кремния различными парами атомов элементов III и V групп позволяют создать практически новый класс материалов с управляемой шириной запрещенной зоны на основе главного материала кремния.

Образование локальной области в решетке кремния, обогащенной нанокластерами  $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ , приводит к появлению в решетке кремния области с прямозонной структурой, похожей на зонную структуру соответствующих полупроводниковых соединений  $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ . Это означает, что существенно повышается коэффициент поглощения во всей области спектра Солнца. Таким образом, с формированием бинарных элементарных ячеек можно

изменить более важный фундаментальный параметр кремния — зонную структуру, которую практически невозможно изменить какими либо другими методами.

В результате формирования бинарных элементарных ячеек с управляемыми параметрами в приповерхностной области можно получить достаточно толсты ( $5 \mu\text{m}$ ) слой кремния. С помощью материала с новыми фундаментальными параметрами, обеспечивающими поглощение света в широком интервале солнечного спектра от УФ до ИК излучения  $\lambda = 0.1-3 \mu\text{m}$ , охватывается весь спектр Солнца. Этим свойством не обладает ни один из существующих полупроводниковых материалов. Самое главное, что это получается на основе основного материала кремния.

## Заключение

Особо следует отметить, что эта диффузионная технология получения таких материалов достаточно отработана, надежна, доступна, а самое главное она основана на действующей диффузионной планарной технологии, не требующей дорогостоящего оборудования, приборов и устройств.

Теперь несколько слов о функциональных возможностях кремния с бинарными, элементарными ячейками. Как показали предварительные расчеты, получение такого материала на основе кремния с бинарными элементарными ячейками с участием Ga-P, P-Al и B-P может увеличивать КПД фотоэлементов на 25–30%. Расчеты также показывают, что при использовании оптимальной технологии, позволяющей получать элементарные ячейки с участием атомов GaP, GaAs, BP с необходимой концентрацией и распределением, можно изготовить фотоэлементы на основе кремния с КПД более 50%. Это означает, что в ближайшем будущем (3–5 лет) дорогостоящие и сложные многокаскадные фотоэлементы на основе  $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$  будут заменены фотоэлементами с более высоким КПД на основе кремния с бинарными элементарными ячейками. Таким образом, предлагаемая научно-обоснованная модель управления фундаментальными параметрами кремния обеспечивает широкомасштабное использование фотоэнергетики в наземных условиях. Такие материалы также позволяют создать новые, надежные и дешевые приборы для оптоэлектроники.

## Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] X. Ru, M. Qu, J. Wang, T. Ruan, M. Yang, F. Peng, W. Long, K. Zheng, H. Yan, X. Xu. Solar Energy Mater. Solar Cells, **215**, 110643 (2020).
- [2] M.A. Green, E.D. Dunlop, D.H. Levi, J. Hohl-Ebinger, M. Yoshita, A.W.Y. Ho-Baillie. Progr. Photovoltaics: Res. Applicat., **27**, 565 (2019).

- [3] V.A. Milichko, A.S. Shalin, I.S. Mukhin, A.E. Kovrov, A.A. Krasilin, A.V. Vinogradov, P.A. Belov, C.R. Simovski. *Phys. Usp.*, **59** (8), 727 (2016).
- [4] Ж.И. Алфёров, *Избранные труды. Нанотехнологии* (Магистр-пресс, М., 2013)
- [5] A. Louwen, W. Sark, R.Schropp, A. Faaij. *Solar Energy Mater. Solar Cells*, **147**, 295 (2016).
- [6] M. Yamaguchi, K.H. Lee<sup>1</sup>, K. Araki, N. Kojima. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **51**, 133002 (2018).
- [7] S. Abdul Hadi, E.A. Fitzgerald, S. Griffiths, A. Nayfeh. *J. Renewable Sustainable Energy*, **10**, 015905 (2018).
- [8] М.А. Путьято, Н.А. Валишева, М.О. Петрушков, В.В. Преображенский, И.Б. Чистохин, Б.Р. Семягин, Е.А. Емельянов, А.В. Васев, А.Ф. Скачков, Г.И. Юрко, И.И. Нестеренко. *ЖТФ*, **89** (7), 1071 (2019).  
DOI: 10.21883/JTF.2019.07.47802.438-18
- [9] K. Chen, R. Kapadia, A. Harker, S. Desai, J.S. Kang, S. Chuang, M. Tosun, C.M. Sutter-Fella, M. Tsang, Y. Zeng, D. Kiriya, J. Hazra, S.R. Madhvarathy, M. Hettick, Yu-Ze Chen, J. Mastandrea, M. Amani, S. Cabrini, Yu-Lun Chueh, J.W. Ager III, D.C. Chrzan, A. Javey. *Nature Commun.*, **7**, 10502 (2016). DOI: 10.1038/ncomms10502
- [10] Н.Д. Гудков. *ЖТФ*, **63** (5), 105 (1993).
- [11] C.-X. Zhao, Y. Huang, J.-Q. Wang, C.-Y. Niu, Y. Jia. *Phys. Lett. A*. **383**, 125903 (2019).
- [12] M.K. Bakhadyrhanov, U.X. Sodikov, D. Melibayev, Tuerdi Wumaier, S.V.Koveshnikov, K.A. Khodjanepesov, Jiangxiang Zhan. *J. Mater. Sci. Chem. Eng.*, **6**, 180 (2018).  
DOI: 10.4236/msce.2018.64017
- [13] M.K. Bakhadyrkhanov, S.B. Isamov, Kh.M. Iliev, S.A. Tachilin, K.U. Kamalov. *Appl. Sol. Energy*, **50** (2), 61 (2014).
- [14] M.K. Bakhadyrhanov, U.X. Sodikov, Kh.M. Iliev, S.A. Tachilin, T. Wumaier, *Mater. Phys. Chem.*, **1**, 89 (2019).
- [15] S. Adachi. *Properties of group-IV, III-V and II-VI semiconductors* (England: John Wiley & Sons Ltd, 2005)
- [16] Б.И. Болтакс. *Диффузия и точечные дефекты в полупроводниках* (Наука, Л., 1972)
- [17] D.V. Saparov, M.S. Saidov, A.S. Saidov. *Appl. Solar Energy*. **52** (3), 236 (2016).
- [18] A.S. Saidov, M.S. Saidov, Sh.N. Usmonov, K.T. Kholikov, D. Saparov. *Appl. Solar Energy*, **43** (3), 183 (2007).
- [19] S. Haridoss, F. Bénéière, M. Gauneau, A. Rupert. *J. Appl. Phys.*, **51** (11), 5833 (1980).
- [20] Y. Sato, I. Sakaguchi, H. Haneda. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **43** (12), 8024 (2004).