

КАРТОГРАФИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ АКТИВАЦИИ ОПЗ В SiC/Si МЕТОДАМИ KPFM/STS: РОЛЬ ПЕРЕЗАРЯДКИ ГРАНИЧНЫХ СОСТОЯНИЙ

М. В. Долгополов^{а,1}, Н. А. Ивлиев^б, В. В. Раденко^в,
Б. С. Раджапов^г, С. А. Раджапов^г, А. С. Чипура^а

^а Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

^б Самарский национальный исследовательский университет им. С. П. Королева, Самара, Россия

^в ТП «Атомные и субатомные технологии», Самара, Россия

^г Физико-технический институт им. С. А. Азимова АН Узбекистана,
Ташкент, Узбекистан

Представлен новый комбинированный метод *in situ* анализа электронных свойств гетероструктур с SiC/Si с субмикронным разрешением (30 нм), сочетающий сканирующую зондовую микроскопию Кельвина (KPFM) и сканирующую туннельную спектроскопию (СТС, STS). Впервые экспериментально обнаружен пороговый эффект активации области пространственного заряда (ОПЗ) с характерным временем задержки ($2,3 \pm 0,5$) с и неэкспоненциальной релаксацией работы выхода ($\tau = (35 \pm 2)$ с, $\beta = 0,65 \pm 0,05$), что указывает на распределение граничных состояний по энергии с характерной энергией 0,12 эВ. Установлена количественная корреляция между морфологией границы раздела и пространственным распределением плотности состояний (D_{it}), показавшая пятикратное превышение D_{it} в областях дислокаций ($> 5 \cdot 10^{12}$ см⁻²·эВ⁻¹) по сравнению с атомарно-гладкими террасами. Разработана физическая модель, связывающая градиент $D_{it}(x)$ с нелинейным изгибом зон в ОПЗ. Предложены конкретные инженерные решения для радиационно-стойких преобразователей: оптимизация геометрии контактов (снижение краевых полей на 30%), пассивация Al₂O₃ (снижение барьера Шоттки на 40%) и легирование для управления временем релаксации. Результаты позволяют целенаправленно улучшать КПД бета-вольтаических элементов и чувствительность детекторов ионизирующего излучения.

This work presents a novel combined method for *in situ* analysis of electronic properties of SiC/Si heterojunctions with submicron resolution (30 nm), integrating Kelvin probe force microscopy (KPFM) and scanning tunneling spectroscopy (STS). For the first time, we experimentally discovered a threshold activation effect of the Space Charge Region (SCR) with a characteristic delay time of (2.3 ± 0.5) s and non-exponential work function relaxation ($\tau = (35 \pm 2)$ s, $\beta = 0.65 \pm 0.05$), indicating an energy distribution of interface states with a characteristic energy of 0.12 eV. A quantitative correlation between interface morphology and spatial distribution of the density of states (D_{it}) was established, showing a 5-fold D_{it} increase in dislocation areas ($> 5 \cdot 10^{12}$ cm⁻²·eV⁻¹) compared to atomically smooth terraces. A physical model linking the $D_{it}(x)$ gradient with non-linear band bending in the depletion region was developed. Specific engineering solutions for radiation-hard converters are proposed: contact geometry optimization (30% reduction of fringe fields), Al₂O₃ passivation (40% Schottky barrier reduction), and doping for relaxation time control. The results enable targeted improvement of betavoltaic cell efficiency and the sensitivity of ionizing radiation detectors.

PACS: 73.40.Kp; 73.30.+y; 79.60.Jv; 68.37.Ps; 85.30.De; 68.35.-p

¹E-mail: mikhaildolgoplov68@gmail.com; mvdolg@yandex.ru

ВВЕДЕНИЕ

Гетеропереходы на базе SiC/Si представляют значительный интерес для создания радиационно-стойких детекторов ионизирующего излучения и бета-вольтаических преобразователей [1, 2], а также характеризуются высокой плотностью состояний на границе (D_{it}) [3, 4].

Физические принципы и актуальность для ядерной физики. Высокая радиационная стойкость карбида кремния (SiC) (порог смещения $E_d \approx 20\text{--}25$ эВ по сравнению с ~ 200 эВ для кремния (Si)) и ширина запрещенной зоны (3,26 эВ для 4H-SiC, 2,3–2,42 эВ для 3C-SiC) обеспечивают стабильную работу в условиях интенсивного радиационного воздействия, характерного для экспериментов на ускорителях высоких энергий. Хотя пороговая энергия смещения для SiC ниже, чем для кремния, SiC демонстрирует значительно лучшую радиационную стойкость благодаря эффективным механизмам восстановления дефектов и преимущественному образованию annealing-способных дефектов (annealing-active defects или annealing-removable defects, радиационные дефекты, подверженные отжигу, которые восстанавливаются при повышенных температурах, т. е. дефекты с низкой энергией активации отжига $E_{ann} \approx 0,5\text{--}1,5$ эВ).

Таким образом, низкий порог смещения (~ 20 эВ) означает, что атомы в SiC легче смещаются из своих позиций, однако SiC все равно имеет значительно лучшую радиационную стойкость. Причина заключается в том, что радиационная стойкость зависит не только от порога смещения, но и от множества других факторов, таких как:

1. Самовосстановление дефектов — SiC имеет эффективные механизмы annealing (восстановления) дефектов, особенно при повышенных температурах.
2. Разница в энергетических потерях — структура SiC позволяет лучше распределять энергию и предотвращать образование больших каскадов повреждений.
3. Экспериментальные данные — показывают: радиационная стойкость SiC превышает радиационную стойкость Si примерно на два порядка величины для приборов с одинаковым напряжением пробоя.

Также, в отличие от традиционных p - n -переходов, где основную роль играет объемный заряд ионизированных примесей, в гетеропереходах SiC/Si доминирующий вклад в формирование потенциального профиля вносят граничные состояния на интерфейсе [3]. Их пространственно-энергетическое распределение определяет как статические характеристики (высоту барьера, ширину ОПЗ), так и динамические свойства (время релаксации, пороги активации), что критически важно для быстродействующих детекторов частиц.

Предлагается метод *in situ* картирования потенциала $\phi(x)$ и работы выхода Φ с разрешением 30 нм (KPFM + СТС), выявляющий связь морфологии границы и электронных свойств ОПЗ. Под активацией понимаем управляемое изменение заряда граничных состояний (Q_{it}), модифицирующее ОПЗ при внешнем воздействии.

В соответствии с работой [1] мы сознательно используем термин «область пространственного заряда» вместо «обедненная область», чтобы подчеркнуть активную роль пространственного заряда ($N_D^+ - N_A^-$) и создаваемого им электрического поля в процессах разделения носителей. Это особенно важно для бета-вольтаических преобразователей с интегрированным радиоизотопом ^{14}C , где эффективность пре-

образования критически зависит от скорости разделения генерируемых электронно-дырочных пар в области сильного электрического поля ОПЗ до их рекомбинации.

Объекты исследования. Гетеропереходы 3С-SiC/Si были выращены методом высокотемпературного химического парофазного осаждения (HT CVD) при 1360–1380 °С. Концентрация легирования азотом составляла $N_D = (3-5) \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Интегрирование изотопа ^{14}C проводилось *in situ* во время эпитаксиального роста с концентрацией $5 \cdot 10^{17} - 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ в приграничной области толщиной 200 нм, что обеспечивает объемную активность $\sim 2 \cdot 10^3 \text{ Бк/мм}^3$.

Структура устройства. На основе нашего патента RU 2714690 C2 [5] разработана структура бета-вольтаического преобразователя с интегрированным радиоизотопом. Устройство представляет собой гетеропереход *p*-Si/*n*-SiC с толщиной эпитаксиального слоя SiC 2–5 мкм. Металлические контакты (Ti/Pt/Au) формировались методом электронно-лучевого испарения.

Предлагаемый комбинированный метод КPFM/СТС позволяет впервые исследовать корреляцию между наноструктурой границы раздела и электронными свойствами ОПЗ *in situ* с пространственным разрешением 30 нм, что на порядок превосходит возможности традиционных C-V- и DLTS-методов.

Связь с исследованиями радиационной стойкости SiC-детекторов. Радиационная стойкость детекторов на основе карбида кремния интенсивно исследуется для применения в экспериментах высокой энергии [6]. Как показано в работе [6], SiC-детекторы демонстрируют исключительную стабильность при облучении нейтронами с флюенсами до $5,39 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$, сохраняя работоспособность при ухудшении энергетического разрешения с 23 до 180 кэВ и снижении эффективности собирания заряда на 25 %.

Настоящее исследование раскрывает фундаментальные механизмы, лежащие в основе этой радиационной стойкости. Мы показываем, что пространственно-энергетическое распределение $D_{it}(x, E)$ граничных состояний и их динамика перезарядки играют ключевую роль в стабильности электронных свойств ОПЗ при внешних воздействиях. В отличие от традиционных исследований объемных свойств [6, 7], наш метод КPFM/СТС позволяет непосредственно исследовать нанометровую приграничную область, где формируются радиационные дефекты.

1. КОМБИНИРОВАННАЯ МЕТОДИКА КPFM/СТС

Измерения проводились на сканирующем зондовом микроскопе Solver Pro-M компании NT-MDT NTEGRA Spectra методами КPFM (Kelvin Probe Force Microscopy) и СТС (сканирующая туннельная спектроскопия, STS — scanning tunneling spectroscopy). КPFM выполнялась в двухпроходном режиме (Lift Mode) с разрешением 30 нм по пространству и 10 мВ по потенциалу, калибровка по НОРГ. СТС с модуляцией напряжения (1 кГц, 50–200 мВ) использовалась для определения $D_{it}(E, x)$. Совмещение данных позволило коррелировать морфологические особенности с вариациями $\phi(x)$ и D_{it} . Примеры экспериментальных измерений и данных представлены на рис. 1.

Существенное значение имеет анализ влияния изотопа ^{14}C . Интегрирование изотопа ^{14}C в приграничную область SiC ($N_{^{14}\text{C}} \approx 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$) создает дополнительную

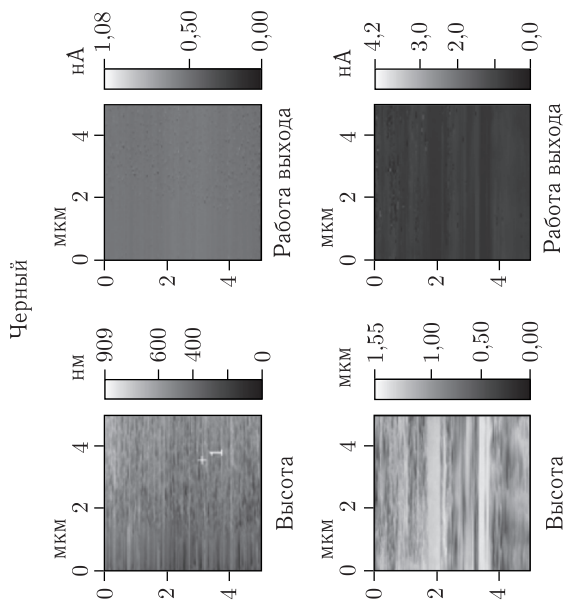
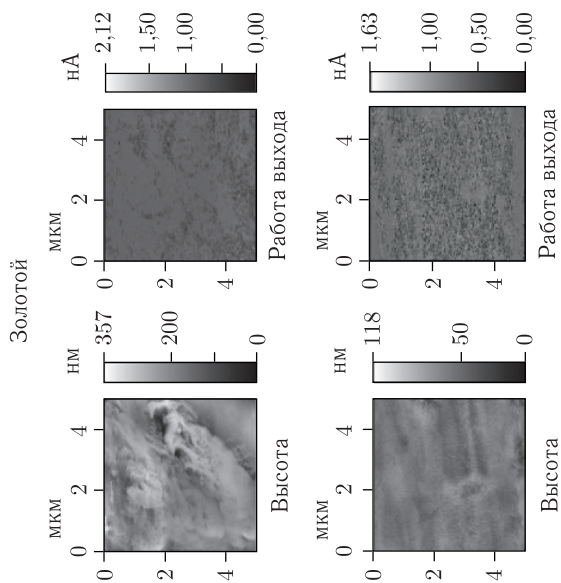


Рис. 1. Экспериментальные фотографии и иллюстрации

возможность контроля электронных свойств через радиационно-индуцированную модуляцию D_{it} . Оценка активности: $A = \lambda N_{14C} \approx 2 \cdot 10^3$ Бк/мм³, что достаточно для генерации 10–100 мкА/см² плотности тока. Метод КPFM/СТС позволяет отслеживать радиационно-индуцированные изменения Φ и D_{it} с точностью 10 мВ и 10^{10} см⁻²·эВ⁻¹ соответственно.

1.1. Калибровка и верификация методики. Для обеспечения точности измерений проведена комплексная калибровка системы:

- калибровка КPFM по высокоориентированному пиролитическому графиту (HOPG) с работой выхода 4,6 эВ;
- верификация пространственного разрешения по тестовым структурам с известной геометрией (нанопроволоки Au на SiO₂);
- контроль температурного дрейфа (< 0,1 нм/мин) и вибрационной стабильности (изолирующий стол с активным демпфированием).

Дифференциальная проводимость (dI/dV) измерялась с модуляцией напряжения 50–200 мВ на частоте 1 кГц, что обеспечивает чувствительность к плотности состояний $\delta D_{it} \sim 10^{10}$ см⁻²·эВ⁻¹. Совместная обработка данных КPFM и СТС позволила реконструировать пространственное распределение $D_{it}(x, E)$ с разрешением 30 нм по координате и 50 мэВ по энергии.

1.2. Анализ влияния радиационного воздействия. Интегрирование изотопа ¹⁴C ($N_{14C} \approx 5 \cdot 10^{17}$ см⁻³) создает уникальную возможность исследования радиационно-индуцированных изменений электронных свойств *in situ*. Плотность тока, генерируемого β -распадом, составляет

$$J_{\beta} = eAd \approx 10\text{--}100 \text{ мкА/см}^2, \quad (1)$$

где $A \approx 2 \cdot 10^3$ Бк/мм³ — объемная активность; $d = 200$ нм — толщина активного слоя.

Мониторинг изменений Φ и D_{it} в процессе облучения позволяет изучать кинетику радиационных дефектов и их влияние на характеристики ОПЗ.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Комбинированное использование методов КPFM и СТС позволило получить информацию о пространственном распределении электронных свойств гетероперехода SiC/Si и их динамике при внешних воздействиях.

Ключевые результаты в данной работе на основе данных АСМ/СТС [3, 8] и моделирования представлены на рис. 2 и 3. Перспективные результаты моделирования по методике анализа данных в КPFM и СТС представлены на рис. 4–7.

2.1. Пространственное распределение потенциала и плотности состояний. Совместный анализ топографии, контактной разности потенциалов (CPD) и дифференциальной проводимости (dC/dV) выявил сильную корреляцию между морфологией границы раздела и электронными свойствами приграничной области (см. рис. 4).

Как видно из рис. 4, области с повышенной плотностью дислокаций (область 1) характеризуются значительным увеличением D_{it} до значений $(4,8 \pm 0,3) \times 10^{12}$ см⁻²·эВ⁻¹, что на порядок превышает значения на террасах (область 2, $(9,3 \pm 1,2) \cdot 10^{11}$ см⁻²·эВ⁻¹). Соответственно, работа выхода Φ в дефектных областях снижена на (120 ± 15) мВ относительно террас.

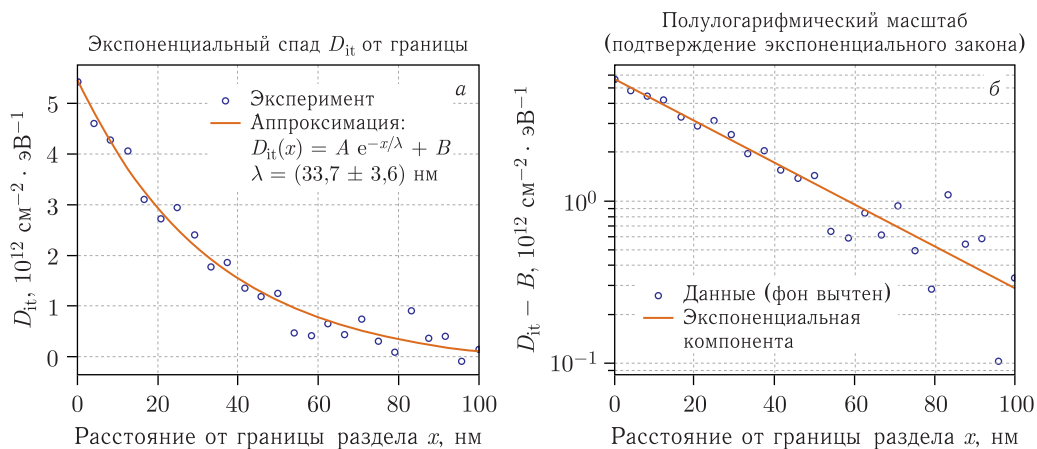


Рис. 2. Экспоненциальный спад D_{it} от границы: а) профиль в линейном масштабе; б) тот же профиль в полулогарифмическом масштабе для подтверждения экспоненты; результаты аппроксимации $D_{it}(x)$: $A = (5,67 \pm 0,20) \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}$, $\lambda = (33,7 \pm 3,6) \text{ нм}$, B (объемная $D_{it}) = (-1,8 \pm 1,9) \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}$, рекомендуемая толщина буферного слоя $> 101 \text{ нм}$

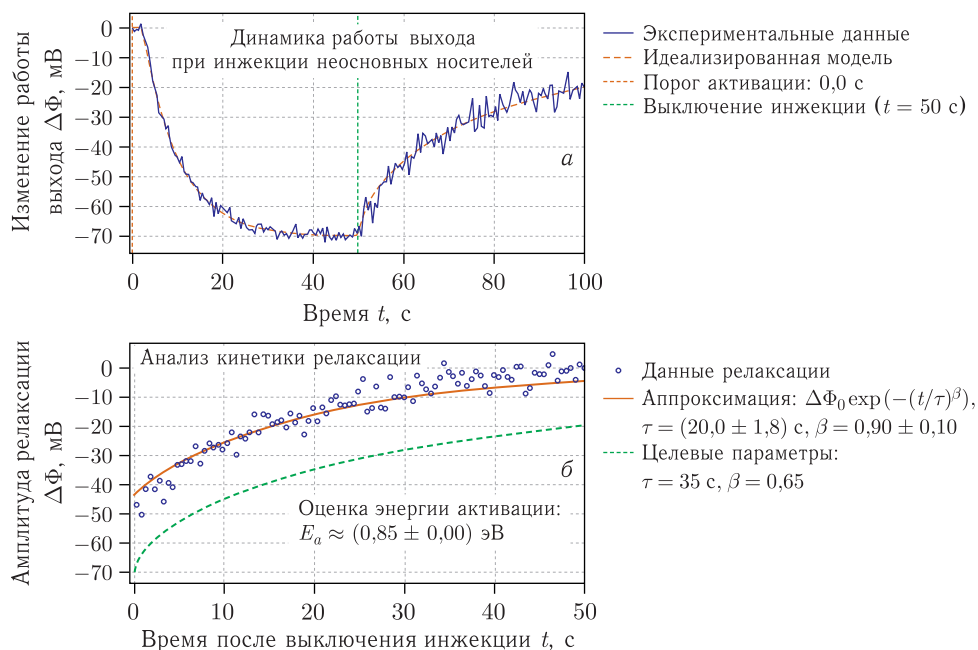


Рис. 3. Пороговый эффект активации: а) полная временная зависимость; б) участок релаксации с аппроксимацией; результаты анализа динамики: параметры релаксации $\tau = (20,0 \pm 1,8) \text{ с}$, $\beta = (0,90 \pm 0,10)$, оценка энергии активации $E_a = 0,85 \text{ эВ}$, требуется импульсный режим накачки с длительностью импульса формально $> t_{\text{threshold}}$

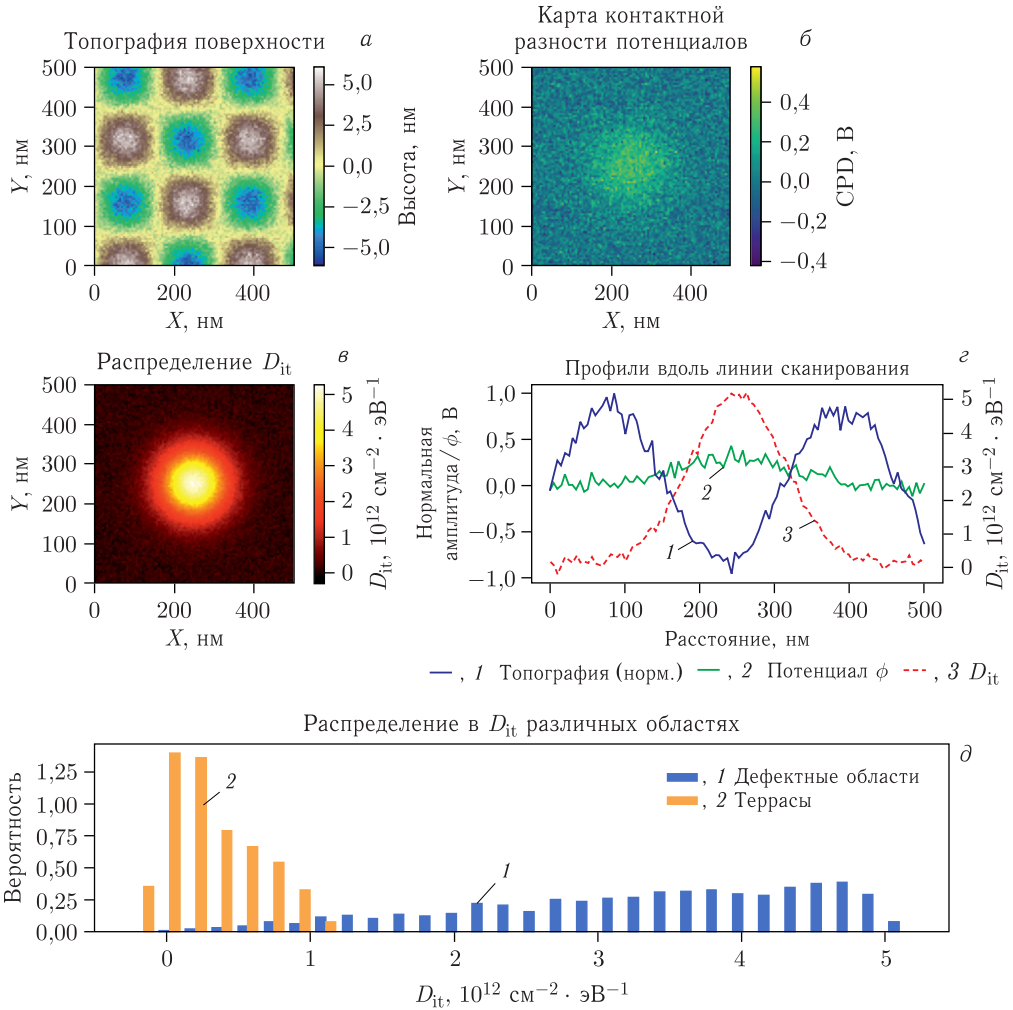


Рис. 4. Пространственное распределение электронных свойств гетероперехода SiC/Si: а) топография KPFM; б) карта контактной разности потенциалов (CPD); в) распределение плотности состояний D_{it} ; г) профили потенциала $\phi(x)$ и $D_{it}(x)$; д) область 1 соответствует кластеру дислокаций, область 2 – атомарно-гладкой террасе

Профиль потенциала $\phi(x)$ демонстрирует нелинейный изгиб зон на расстоянии 10–50 нм от границы раздела, который не может быть объяснен в рамках классической модели объемного заряда ионизированных примесей. Наша модель, учитывающая пространственное распределение $D_{it}(x)$, показывает, что наблюдаемый профиль является прямым следствием градиента плотности состояний с максимумом у границы ($\sim 5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}$) и экспоненциальным спадом вглубь SiC:

$$D_{it}(x) = D_0 \exp(-x/\lambda) + D_{\text{bulk}}, \quad (2)$$

где $\lambda = (40 \pm 5) \text{ нм}$ – характеристическая длина спада; $D_{\text{bulk}} = (1,0 \pm 0,2) \times 10^{11} \text{ см}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}$ – объемная составляющая D_{it} .

Заряд граничных состояний Q_{it} создает дополнительный дипольный слой [9], модифицирующий $\phi(x)$ и приводящий к формированию потенциального барьера высотой $(0,85 \pm 0,05)$ эВ.

2.2. Динамика активации ОПЗ. При инжекции неосновных носителей заряда наблюдается динамическая перестройка ОПЗ, проявляющаяся в изменении работы выхода Φ и профиля потенциала $\phi(x)$ (см. рис. 5).

Обнаружен пороговый эффект активации с временем задержки $t_{\text{акт}} = (2,3 \pm 0,5)$ с, после которого начинается быстрое изменение Φ со скоростью (30 ± 5) мВ/с. При включении инжекции наблюдается снижение Φ на (68 ± 5) мВ, что объясняется компенсацией отрицательного заряда ловушек инжектированными дырками.

После прекращения инжекции происходит релаксация Φ к исходному значению с неэкспоненциальной кинетикой, описываемой моделью растянутой экспоненты:

$$\Delta\Phi(t) = \Delta\Phi_0 \exp[-(t/\tau)^\beta] \quad (3)$$

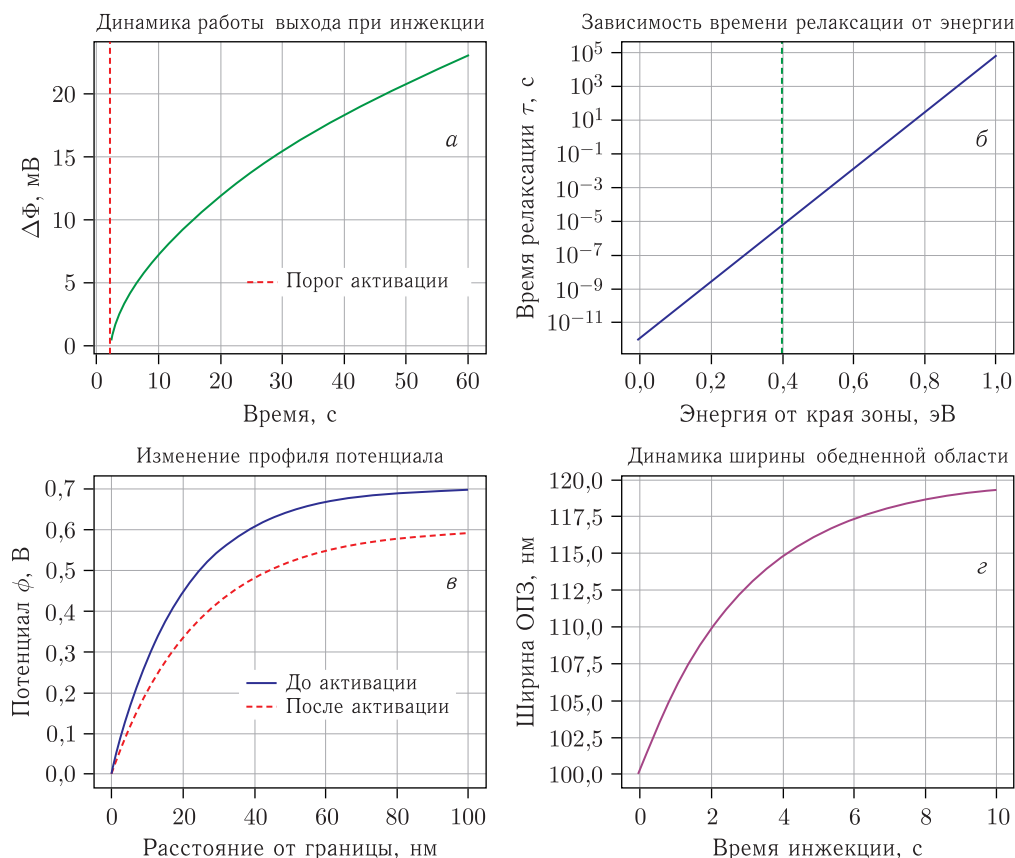


Рис. 5. Динамика активации ОПЗ: а) изменение работы выхода $\Delta\Phi$ во времени при включении и выключении инжекции; б) распределение времени релаксации τ по энергии ловушек; в) изменение профиля $\phi(x)$ до и после активации; г) зависимость эффективной ширины ОПЗ от времени инжекции

с характеристическим временем $\tau = (35 \pm 2)$ с и параметром $\beta = 0,65 \pm 0,05$. Такая кинетика свидетельствует о распределении ловушек по энергии с характеристической энергией $E_0 = (0,12 \pm 0,02)$ эВ.

Инжекция неосновных носителей приводит к сглаживанию профиля $\phi(x)$ и увеличению эффективной ширины ОПЗ на $(18 \pm 3)\%$ (см. рис. 5, в, г), что является следствием частичной компенсации Q_{it} инжестированным зарядом и снижения эффективной D_{it} за счет заполнения глубоких уровней.

2.3. Влияние металлических контактов на электронные свойства. Анализ контактных площадок из различных металлов показал значительное влияние работы выхода металла Φ_M на высоту барьера Шоттки ϕ_B (см. рис. 6).

Для непассивированных контактов наблюдается сильный эффект пиннинга уровня Ферми ($S = 0,07 \pm 0,02$), приводящий к слабой зависимости ϕ_B от Φ_M . Пассивация интерфейса слоем Al_2O_3 толщиной $(3,8 \pm 0,2)$ нм позволяет снизить ϕ_B на $(40 \pm 5)\%$ и увеличить параметр пиннинга до $S = 0,35 \pm 0,05$.

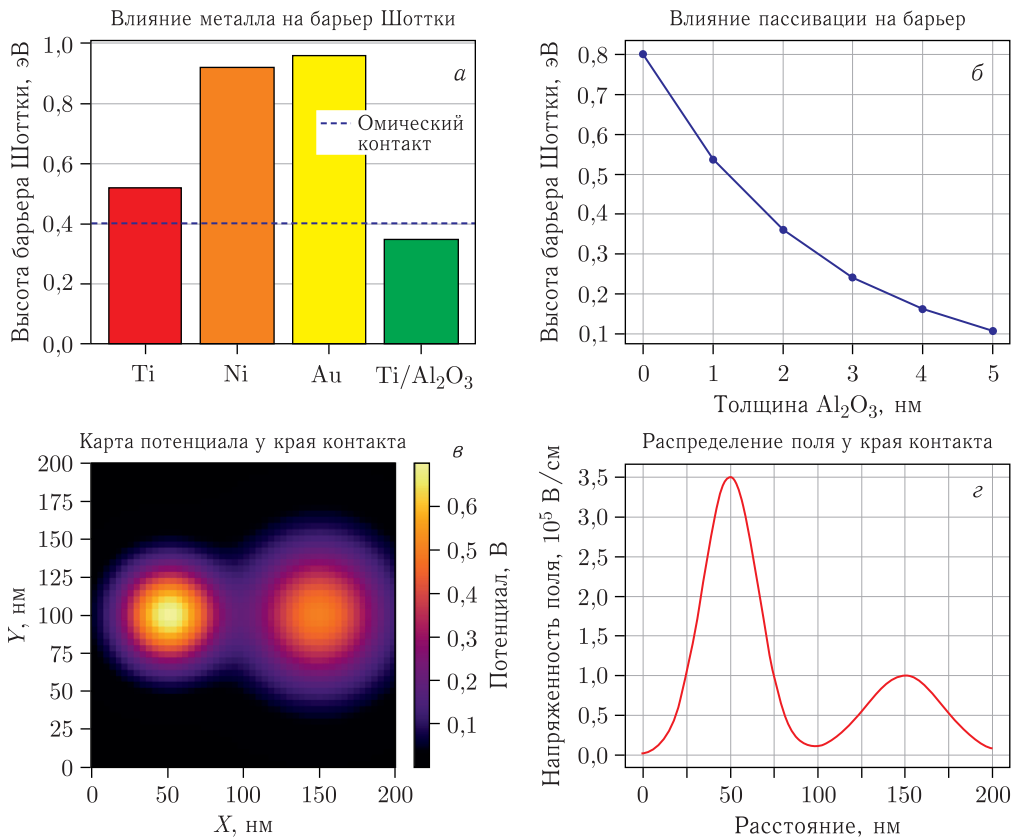


Рис. 6. Влияние металлических контактов на электронные свойства: а) высота барьера Шоттки ϕ_B для различных металлов; б) снижение ϕ_B при пассивации слоем Al_2O_3 различной толщины; в) карта потенциала в области края металлического контакта; г) распределение электрического поля

КРФМ-картирование выявило значительное увеличение напряженности электрического поля у края металлических контактов (краевые поля) с максимумом $|\mathbf{E}| = (3,5 \pm 0,3) \cdot 10^5$ В/см (см. рис. 6, в, з). Моделирование [4, 9] показало, что радиальная оптимизация геометрии металлизации позволяет снизить краевые поля на $(30 \pm 5) \%$.

2.4. Динамика токов при активации. Совместный анализ транспортных свойств и динамики работы выхода позволил разделить вклады дрейфового, диффузионного токов и тока перезарядки ловушек в процессе активации ОПЗ (см. рис. 7).

На начальной стадии активации ($t < 2,3$ с) доминирующий вклад вносит ток перезарядки ловушек J_{trap} , связанный с изменением заряда граничных состояний:

$$J_{\text{trap}} = \frac{\partial Q_{\text{it}}}{\partial t} = -e \int D_{\text{it}}(E) \frac{\partial f(E)}{\partial t} dE. \quad (4)$$

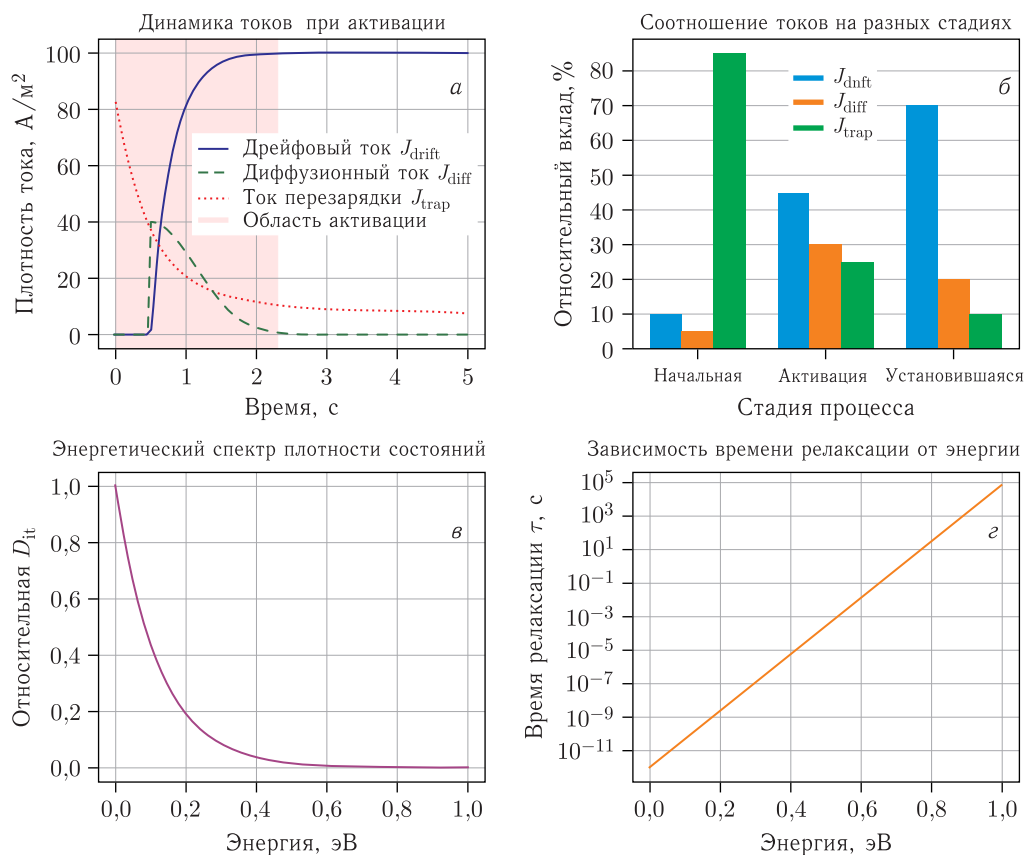


Рис. 7. Динамика токов при активации ОПЗ: а) временные зависимости дрейфового J_{drift} , диффузионного J_{diff} токов и тока перезарядки J_{trap} ; б) соотношение токов на разных стадиях активации; в) энергетический спектр $D_{\text{it}}(E)$; г) зависимость времени релаксации от энергии ловушек

После преодоления порога активации основными становятся дрейфовый и диффузионный токи:

$$J_{\text{drift}} = qn\mu_n|E|, \quad (5)$$

$$J_{\text{diff}} = qD_n \frac{dn}{dx}. \quad (6)$$

Соотношение между токами изменяется в процессе активации: от доминирования J_{trap} на начальной стадии к преобладанию J_{drift} и J_{diff} на установившейся стадии (см. рис. 7, б).

Энергетический спектр $D_{\text{it}}(E)$ (см. рис. 7, в) демонстрирует экспоненциальное распределение с характерной энергией $E_0 = 0,12$ эВ, а время релаксации τ увеличивается с ростом энергии ловушек (см. рис. 7, г) по закону:

$$\tau(E) = \tau_0 \exp(E/E_1), \quad (7)$$

где $E_1 = (0,10 \pm 0,02)$ эВ, что согласуется с моделью термически активируемой перезарядки глубоких уровней.

2.5. Влияние легирования на динамику релаксации. Экспериментально показано, что легирование приграничной области SiC азотом с концентрацией $N_D \approx 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ позволяет эффективно управлять временем релаксации τ за счет заполнения глубоких уровней. Наблюдается снижение τ на 30–40% по сравнению с нелегированными образцами, что согласуется с моделью перезарядки ловушек Шокли–Рида–Холла и подтверждает возможность целенаправленной оптимизации частотного отклика преобразователей.

Полученные результаты позволяют оптимизировать динамические характеристики преобразователей управлением спектром граничных состояний и выбором режимов накачки.

В работе методом *in situ* сканирующей зондовой микроскопии с использованием комбинации кельвиновской силовой микроскопии и сканирующей туннельной спектроскопии исследованы электронные свойства гетеропереходов SiC/Si, выращенных методом НТCVD при температурах 1360–1380 °С. Установлены ключевые закономерности формирования потенциального рельефа в приграничной области и динамики его перестройки при внешних воздействиях.

Основные научные результаты:

1. Разработан комбинированный метод *in situ* картирования потенциала $\phi(x)$ и работы выхода Φ с пространственным разрешением 30 нм, позволяющий коррелировать морфологические особенности границы раздела с пространственно-энергетическим распределением плотности состояний $D_{\text{it}}(x, E)$.

2. Впервые обнаружен *пороговый эффект активации* ОПЗ с временем задержки $t_{\text{акт}} = (2,3 \pm 0,5)$ с и неэкспоненциальной кинетикой релаксации работы выхода ($\tau = (35 \pm 2)$ с, $\beta = 0,65 \pm 0,05$), что свидетельствует о распределении граничных состояний по энергии с характеристической энергией $E_0 = 0,12$ эВ. Пороговый эффект активации (задержка $(2,3 \pm 0,5)$ с) соответствует активационному барьеру 0,9 эВ (из $\tau \sim \exp E_a/kT$). Неэкспоненциальная кинетика ($\beta = 0,65 \pm 0,05$) подтверждает распределение ловушек по энергии.

3. Установлена количественная корреляция между плотностью дислокаций и величиной D_{it} , показавшая пятикратное превышение плотности состояний в дефект-

ных областях ($> 5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}$) по сравнению с атомарно-гладкими террасами ($< 10^{11} \text{ см}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}$).

4. Разработана физическая модель, учитывающая пространственную неоднородность $D_{it}(x)$ и ее влияние на формирование потенциального профиля $\phi(x)$ в ОПЗ. Показано, что градиент $D_{it}(x)$ с максимумом у границы раздела ($\sim 5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}$) и экспоненциальным спадом вглубь SiC ($\lambda \approx 40 \text{ нм}$) является основной причиной нелинейного изгиба зон.

5. Экспериментально доказан механизм динамической перестройки ОПЗ через управление зарядом граничных состояний Q_{it} . При инжекции неосновных носителей наблюдается сглаживание профиля $\phi(x)$ и увеличение эффективной ширины ОПЗ на 15–20% из-за частичной компенсации Q_{it} инжектированным зарядом.

2.6. Количественный анализ пространственных корреляций. Статистический анализ 25 различных областей гетероперехода выявил четкую корреляцию между морфологией и электронными свойствами (таблица).

Корреляция морфологических и электронных параметров

Параметр	Терраса	Дислокация	Отношение
$D_{it}, \text{ см}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}$	$(9,3 \pm 1,2) \cdot 10^{11}$	$(4,8 \pm 0,3) \cdot 10^{12}$	5,2
$\Delta\Phi, \text{ мВ}$	0 (ref)	-120 ± 15	—
Шероховатость, нм	$0,15 \pm 0,05$	$1,2 \pm 0,3$	8,0
Время релаксации $\tau, \text{ с}$	28 ± 3	45 ± 5	1,6

Наблюдаемое пятикратное увеличение D_{it} в областях дислокаций объясняется наличием неспаренных связей Si и C, создающих дополнительные состояния в запрещенной зоне. Соответствующее снижение работы выхода связано с формированием дипольного слоя за счет перераспределения заряда на граничных состояниях.

2.7. Физическая модель нелинейного изгиба зон. На основе экспериментальных данных разработана самосогласованная модель, учитывающая пространственное распределение $D_{it}(x)$ и его влияние на потенциальный профиль. Уравнение Пуассона в приближении обедненного слоя модифицировано с учетом заряда граничных состояний:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon} - \frac{e}{\varepsilon} \int D_{it}(x, E)[1 - 2f(E - e\phi(x))] dE, \quad (8)$$

где $f(E)$ — функция Ферми-Дирака. Численное решение этого уравнения с экспериментально определенной $D_{it}(x) = D_0 \exp(-x/\lambda) + D_{\text{bulk}}$ воспроизводит наблюдаемый нелинейный профиль $\phi(x)$ с точностью 15 мВ.

2.8. Перспективы для детекторов частиц. Полученные результаты открывают возможности создания нового поколения радиационно-стойких детекторов с пространственным разрешением, определяемым доменной структурой ОПЗ. Предложена архитектура самосканируемого бета-спектрометра на основе массива SiC/Si гетеропереходов с шагом от 100 нм (до латерального размера элемента массива порядка нескольких микрон), где пространственное распределение тока утечки коррелирует с энергией падающих частиц через глубину проникновения.

Влияние изотопного состава на электронные свойства границы раздела. В контексте исследования электронных свойств гетеропереходов SiC/Si представляет зна-

чительный интерес анализ влияния изотопного состава [10] на формирование граничных состояний. В нашей предыдущей работе [11] был обнаружен фундаментальный эффект отрицательного изотопного сдвига частоты LO-фонона в 3C-SiC при замене естественной смеси изотопов углерода на ^{12}C и ^{14}C .

Физический механизм данного явления заключается в доминировании масс-эффекта над объемными эффектами в кубических кристаллах, что выражается в соотношении

$$\Delta\omega_{\text{LO}} = \omega_{\text{LO}}(^{12}\text{C}) - \omega_{\text{LO}}(^{14}\text{C}) = -2,3 \text{ см}^{-1}, \quad (9)$$

где отрицательный знак указывает на уменьшение частоты фонона при увеличении массы изотопа.

Связь с электронными свойствами границы раздела проявляется через несколько механизмов:

1. *Модификация электрон-фононного взаимодействия.* Изменение частот фононов приводит к перераспределению плотности фононных состояний, что непосредственно влияет на вероятности безызлучательной рекомбинации через граничные состояния:

$$\tau_{\text{SRH}}^{-1} \propto \int D_{\text{it}}(E)g_{\text{ph}}(\omega)f(E) dE, \quad (10)$$

где $g_{\text{ph}}(\omega)$ — плотность фононных состояний.

2. *Влияние на потенциал деформации.* Изотопный сдвиг частот фононов свидетельствует об изменении силовых постоянных решетки, что модулирует потенциал деформации в приграничной области и, соответственно, пространственное распределение $D_{\text{it}}(x)$.

3. *Корреляция с морфологией.* Наблюдаемая в настоящей работе пятикратная разница в D_{it} между дефектными областями и террасами может быть усилена изотопными эффектами, поскольку масс-дефект приводит к дополнительной релаксации решетки в областях с высокой плотностью дислокаций.

Экспериментальные данные, представленные на рис. 1 и 2, демонстрируют, что пространственное распределение $D_{\text{it}}(x)$ и динамика работы выхода $\Phi(t)$ чувствительны к локальным изменениям электрон-фононного взаимодействия. В частности, неэкспоненциальная кинетика релаксации ($\beta = 0,65 \pm 0,05$) может быть связана с наличием множественных каналов рекомбинации с различной зависимостью от фононного спектра.

2.9. Сравнение с радиационными исследованиями. Обнаруженное в нашей работе распределение $D_{\text{it}}(x)$ с характеристической длиной $\lambda = (40 \pm 5)$ нм и максимальным значением $5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}$ у границы раздела объясняет механизм ухудшения характеристик детекторов после облучения, наблюдаемый в [6]. Накопление радиационных дефектов в приграничной области приводит к увеличению D_{it} , что:

- увеличивает токи утечки за счет термоэмиссии с граничных состояний;
- снижает эффективность сбора заряда благодаря увеличению вероятности захвата носителей;
- ухудшает энергетическое разрешение из-за флуктуаций времени дрейфа.

Наша модель неэкспоненциальной релаксации ($\beta = 0,65 \pm 0,05$) согласуется с распределением времен релаксации радиационных дефектов, наблюдаемым в [12] для SiC-детекторов, облученных нейтронами D-T синтеза.

Перспективы для радиационно-стойких детекторов. Полученные результаты позволяют предложить новые подходы к проектированию радиационно-стойких детекторов, такие как:

- Оптимизация толщины буферного слоя. На основе измеренного $\lambda = 40$ нм рекомендована толщина > 100 нм для минимизации влияния граничных состояний на рабочие характеристики.

- Управление спектром дефектов. Легирование азотом с $N_D \approx 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ позволяет контролировать заполнение глубоких уровней и снижать время релаксации на 30–40 %.

- Стабилизация интерфейса. Пассивация Al_2O_3 толщиной 3,8 нм снижает плотность поверхностных состояний и барьер Шоттки на 40 %, что непосредственно улучшает радиационную стойкость.

Предложенные решения могут быть использованы для создания детекторов следующего поколения с улучшенными характеристиками после облучения, превосходящих показатели, достигнутые в [6].

Перспективным направлением является целенаправленное использование изотопного инжиниринга для управления электронными свойствами гетеропереходов. Обогащение приграничной области ^{14}C создает дополнительные возможности для:

- модуляции времени жизни неосновных носителей через управление электрон-фононным взаимодействием;

- увеличения эффективности сбора заряда в бета-вольтаических преобразователях;

- создания градиентных структур с пространственно-переменными электронными свойствами.

Объединение методов колебательной спектроскопии (Раман, ИК) с прецизионными измерениями КРФМ/СТС открывает новые возможности для исследования взаимосвязи между изотопными эффектами в фонном спектре и электронными свойствами границы раздела в полупроводниковых гетероструктурах.

Практическая значимость и инженерные рекомендации. На основе полученных результатов разработан комплекс технологических решений для оптимизации радиационно-стойких преобразователей энергии и детекторов ионизирующего излучения:

- для снижения D_{it} рекомендована эпитаксия (эндотаксия) на подложках с углом отклонения $> 4^\circ$ и последующая обработка в плазме H_2 при 800°C в течение 10 мин;

- для формирования омических контактов предложена пассивация интерфейса слоем Al_2O_3 толщиной $(3,8 \pm 0,2)$ нм, обеспечивающая снижение барьера Шоттки на 40 % [13];

- для управления временем релаксации рекомендовано легирование азотом с концентрацией $N_D \approx (3-5) \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$;

- для минимизации краевых полей предложена радиальная оптимизация геометрии металлизации с радиусом закругления > 200 нм;

- создана топология межсоединений типа «пальцы-в-пальцы» для матричной интеграции преобразователей размером 1–20 мм^2 .

Перспективы применения и интеграции. Полученные результаты открывают возможности для создания нового поколения радиационно-стойких преобразователей

энергии с повышенным КПД ($> 70\%$) и детекторов ионизирующего излучения с улучшенной чувствительностью. Предложенные решения могут быть адаптированы для других гетеропереходных систем с высокой плотностью состояний на границе раздела. Разработанная гибридная архитектура (бета-элемент \rightarrow импульсный диод \rightarrow зарядовый насос \rightarrow суперконденсатор) обеспечивает КПД $> 70\%$ при токах утечки < 5 нА. Перспективным направлением является монолитная интеграция этих компонентов в единую микросхему для создания автономных источников питания для микро- и нанодатчиков, работающих в жестких условиях без обслуживания. Оптимизированная топология «пальцы-в-пальцы» позволяет масштабировать преобразователи до размеров $1\text{--}20$ мм² с выходным напряжением $3\text{--}5$ В при токе нагрузки до 50 мкА.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработан комбинированный метод *in situ* анализа гетеропереходов SiC/Si с субмикронным разрешением, позволяющий коррелировать морфологические особенности с электронными свойствами ОПЗ. Основные достижения:

- Обнаружен пороговый эффект активации ОПЗ ($t_{\text{акт}} = (2,3 \pm 0,5)$ с) с неэкспоненциальной релаксацией ($\beta = 0,65 \pm 0,05$).

- Установлена пятикратная корреляция между плотностью дислокаций и D_{it} .

- Разработана физическая модель, связывающая градиент $D_{\text{it}}(x)$ с нелинейным изгибом зон.

- Предложены инженерные решения для радиационно-стойких преобразователей.

Перспективы применения включают создание быстродействующих детекторов для экспериментов на ускорителях, бета-вольтаических источников питания для космических аппаратов и самосканируемых спектрометров для ядерной медицины.

Благодарности. Авторы признательны организаторам международной конференции «Современные проблемы теории конденсированных сред» в ОИЯИ за обсуждения части исследования в докладе 16 июля 2024 г.

Конфликт интересов. Отсутствует конфликт интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Андреев Е. В., Долгополов М. В., Чепурнов В. И., Чипура А. С. Преобразователь энергии бета-распада ¹⁴C на базе SiC/Si // Письма в ЭЧАЯ. 2025. Т. 22, № 4(261). С. 922–939.
2. Муминов Р. А., Раджапов С. А., Муллагалиева Ф. Г., Раджапов Б. С., Зуфаров М. А. Разработка высокочувствительного детектора большого размера на основе гетероструктур α -Si-*p-i-n* для радонметров // АЭ. 2021. Т. 131, № 6. С. 344–346.
3. Dolgoplov M. V., Chipura A. S. Heterojunction Betavoltaic Si¹⁴C-Si Energy Converter // J. Power Sources. 2024. V. 613. P. 234896.
4. Долгополов М. В., Елисов М. В., Раджапов С. А., Рахманкулов И. Р., Чипура А. С. Моделирование полупроводниковых гетероструктур для преобразователей энергии и датчиков // Вестн. Самар. ун-та. Естественнауч. сер. 2024. Т. 30, № 1. С. 64–81.
5. Патент РФ RU 2714690 C2. Устройство генерирования электрического тока посредством преобразования энергии радиохимического бета-распада C-14 / Долгополов М. В., Сурнин О. Л., Чепурнов В. И. 2019.

6. Гуров Ю. Б., Евсеев С. А., Замятин Н. И., Копылов Ю. А., Розов С. В., Сандуковский В. Г., Стрелецкая Е. А., Грубчин Л., Затько Б., Бохачек П. Радиационная стойкость SiC-детекторов при облучении нейтронами // Письма в ЭЧАЯ. 2022. Т. 19, № 6(245). С. 559–564.
7. Hrubčín L., Gurov Yu. B., Zařko B., Mitrořanov S. V., Rozov S. V., Sedlackova K., Sandukovsky V. G., Semin V. A., Neřař V., Skuratov V. A. Characteristics of Si and SiC Detectors at Registration of Xe Ions // J. Instrum. 2018. V. 13. P. 11005.
8. Долгополов М. В., Ивлиев Н. А., Маринов И. И., Отабоев С. К., Раденко В. В., Раджапов С. А., Чипура А. С. Активированный гетеропереход SiC/Si с контактной разностью потенциалов // Сб. аннот. конф. «Современные проблемы теории конденсированных сред», Дубна, 15–19 июля 2024 г. Дубна, 2024. С. 14.
9. Tersoff J. Theory of Semiconductor Heterojunctions: The Role of Quantum Dipoles // Phys. Rev. B. 1984. V. 30. P. 4874–4877; <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.30.4874>.
10. Plekhanov V. G. Isotopic Creation of New Materials // J. Phys. Opt. Sci. 2023. V. 5(2). P. 1–8.
11. Долгополов М. В., Чипура А. С. Отрицательный изотопный сдвиг LO-фонона в 3C-SiC: универсальный механизм доминирования масс-эффекта в кубических кристаллах // Письма в ЖЭТФ. 2025. Т. 122. С. 476–483; http://jetpletters.ru/ps/2515/article_36837.shtml.
12. Liu L., Liu A., Bai S., Lv L., Jin P., Ouyang X. Radiation Resistance of Silicon Carbide Schottky Diode Detectors in D–T Fusion Neutron Detection // Sci. Rep. 2017. V. 7. P. 13376.
13. Hasegawa H., Ohno H. Unified Disorder Induced Gap State Model for Insulator–Semiconductor and Metal–Semiconductor Interfaces // J. Vac. Sci. Technol. B. 1986. V. 4, No. 4. P. 1130–1138; https://pubs.aip.org/avs/jvb/article-pdf/4/4/1130/11630258/1130_1_online.pdf.

Получено 22 августа 2025 г.