

LXXII МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ЯДРО–2022:
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ И ПРИЛОЖЕНИЯ

ПРИМЕНЕНИЕ ЯДЕРНО–ФИЗИЧЕСКИХ МЕТОДОВ В НАУКЕ И ТЕХНОЛОГИЯХ

Контакты для SiC-преобразователей в диапазоне нано–микроватт

А. В. Гурская,^{1,*} М. В. Долгополов,^{1,2,†} С. А. Раджапов,^{3,‡} В. И. Чепурнов^{2,§}¹Самарский государственный технический университет, кафедра
высшей математики. Молодогвардейская, 244, Самара 443100, Россия²Самарский университет, кафедра общей и теоретической физики, кафедра физики
твёрдого тела и неравновесных систем. Россия, 443086, Самара, Московское шоссе, 34³Физико-технический институт НПО «Физика–Солнце» АН Республики Узбекистан,
лаборатория «Полупроводниковые высокочувствительные датчики»

Узбекистан, 100084, Ташкент, ул. Чингиза Айтматова, 2Б

(Поступила в редакцию 17.10.2022; после доработки 15.11.2022; принята к публикации 22.11.2022)

Целью исследования является рассмотрение внутренних процессов в приконтактной зоне полупроводника с радионуклидным микролегированием: диффузия атомов при эндотаксии, диффузия атомов после распада радионуклидов, образование неравновесных носителей — электрон–дырочных пар и особенности материала, возникающие при такой диффузии. Подход DFT в данной работе направлен на получение доказательств вакансионного механизма диффузии. Атомы радионуклида диффундируют в растущий слой карбида кремния на кремнии при сверхстереометрическом легировании с сохранением валентности и типа проводимости примеси, образуя в зависимости от фазы эффекты, энергетически проявляющиеся как эффект «внутреннего солнца», который является источником электронов и электрон–дырочных пар при ионизационных потерях. Это обусловлено взаимодействиями с электронами оболочек соседних атомов, приводящими к образованию электронов и дырок в области пространственного заряда, разносимых встроенными электрическими полями.

PACS: 73.40.Kp, 61.72.Vv. УДК: 53.06, 621.315.592.3.

Ключевые слова: радиационно–стимулированная контактная зона, гетероструктуры карбида кремния на кремнии, микролегирование, радионуклид, гетероэндотаксия, дефектообразование, p – n –переход, CVD.

DOI: 10.55959/MSU0579-9392.78.2310103

ВВЕДЕНИЕ

Интерес к генерации электроэнергии на уровне нано–микроватт возобновился в последние пять–семь лет, и вновь актуальна идея создания устройств для преобразования энергии в электрическую [1]. Работы активно велись в 2015–2017 гг. [2–6] с целью получения дополнительной выходной мощности. Существуют устройства преобразователей, использующие взаимодействие радионуклидов со структурой кубической фазы 3C–SiC [7].

Электромагнитная волна бета–электронного излучения распространяется в потенциальном поле идеальной кристаллической решетки в 4π -стерадиан. Гетероструктура SiC/Si испытывает механические напряжения несоответствия параметров решеток порядка 20%, пленка SiC–фазы испытывает напряжения растяжения, а Si–фаза подложки — сжатия, релаксация критических

механических напряжений до остаточных сопровождается формированием сетки дислокаций преимущественно в Si–фазе при температуре роста пленки. Фазовое поле ОПЗ гетероперехода асимметрично относительно металлургической границы вследствие градиента концентрации легирующей примеси. Разделение неравновесных носителей электрон–дырочных пар происходит во встроенном электростатическом поле ОПЗ гетероперехода. Важно отметить для целей моделирования, что на энергетическое взаимодействие оказывает влияние состояние системы в отношении сетки дислокаций. Потенциально следует ожидать, что на заряженных дислокациях, имеющих свое ОПЗ–электростатическое поле, поглощение будет в длинноволновой части энергетического спектра бета–электронов, вследствие бета–распада радиоуглерода, т.е. в системе имеется сложный вопрос взаимодействия электромагнитной волны с веществом, поглощение в анализируемой системе полное, но неоднородно в разных областях структуры (SiC–пленке, Si–подложке, металлургической границе, на сетке дислокаций в Si–фазе).

В основе технологии лежит полупроводниковая структура, способная оптимально преобразовывать энергию спектра бета–излучения с замещением ато-

* E-mail: a-gurska@yandex.ru

† E-mail: mikhaildolgopopolov68@gmail.com

‡ E-mail: rsafti@mail.ru

§ E-mail: chvi44@yandex.ru

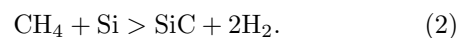
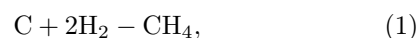
мов в сверхстехиометрических межузельных имплантированных атомах во внешний электрический ток. Это происходит за счет диффузии радионуклидов в растущий слой карбида кремния при сверхстехиометрическом легировании с сохранением валентности и типа проводимости примеси (будем называть такое легирование изоэлементным легированием) и проявляется как эффект спонтанных микроплазменных сфер или неидеальных сфер вида жгутов или цилиндров на масштабе диффузионной длины, так как при энергиях бета-электронов до 156 кэВ, при средней энергии в спектре бета-излучения порядка 49 кэВ, высвобождаемых в виде спектра бета-распада так же, как эффект «внутреннего солнца», они взаимодействуют с электронами и ядрами соседних атомов, только имея ионизационные потери, с учетом порога менее 8 эВ рождения электрон-дырочной пары образуется более тысячи таких пар с высокой удельной плотностью энергии. Можно назвать лишь почти аналогичную систему на основе алмаза [8], поэтому технология уникальна. Также в [9] упоминались некоторые близкие технологически проблемы. При этом структура взаимосвязей компонентов на молекулярном уровне [10] является определяющей. Здесь предполагается диффузионный механизм на основе встречного движения атомов углерода и кремния по вакансионному механизму и взаимное проникновение решеток кремния и углерода друг в друга [11, 12].

Мы полагаем, что наличие электрического поля в ОПЗ является основным источником разделения генерируемых электронов и дырок, дипольные поля на интерфейсе контактирующих поверхностей приводят к эффективному разделению носителей заряда. Моделирование таких процессов является многопараметрической задачей на оптимизацию. Конкретная проблема описания генерации электронов в p - n -переходе может быть смоделирована методом Монте-Карло [13]. Количество электронов возможно рассчитать в зависимости от активности источника бета-излучения. Итак, рассмотрим все эти процессы вместе, а также обобщим экспериментальные данные.

1. РОСТ СТРУКТУР В ПРОЦЕССЕ ЭНДОТАКСИИ

Особенность эндотаксии — это процесс формирования новой фазы, наследующей кристаллографическую ориентацию подложки, причем подложка выступает в качестве одного из компонентов формирования новой фазы. Если быть точным, то имеется в виду кубическая фаза карбида кремния $3C$ -SiC, которая возможна для p - или n -типа. Радионуклид ^{14}C внедряется вместо ^{12}C в фазу SiC в пористую или непористую гетероструктуру SiC/SiC/Si при эндотаксии в CVD-реакторе. Концепция основана на твердофазном переходе из Si-фазы в SiC-фазу, что позволяет накапливать ^{14}C

в фазе гетероструктуры или гетероперехода [7]. Процесс эндотаксии осуществляется в потоке водорода. Пленка карбида кремния растет за счет градиента осаждения углерода (концентрация углерода в поверхностных слоях выше предела растворимости) и образования соединения с фазой Si. Соответствующие две стадии представляются уравнением (1) и уравнением (2):



Акцентируем основное внимание на том, что бета-электроны сами по себе не являются током, а являются лишь причиной и источником образования электронов и дырок. Электроны создают электрический ток в конечном устройстве, либо аккумулируются внутри при определенном сочетании гетероструктур и соответствии изменений энергетических зон и квазиуровней Ферми, что зависит также от концентрации различных носителей заряда, в том числе в зависимости от концентрации легирующих примесей, зависит в конечном счете и от нагрузки. Отметим также, что легирование для получения p - или n -типа проводимости осуществляется и в CVD-реакторе. В итоге структура содержит радионуклид не только как источник энергии, но и потенциальное место рождения электронов и дырок в ОПЗ.

2. ИЗМЕРЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК

Лабораторные образцы исследовались без учета процесса порообразования. Интересны результаты измерения тока и напряжения для трех образцов в двух случаях: 1 — в случае дополнительного источника света; 2 — в темноте. Результаты представлены в виде графиков на рис. 1. Эти три гетероструктуры различаются последовательностью наращивания слоев в CVD-реакторе, а также типом полупроводниковой структуры в результате легирования:

a: n -SiC/ p -SiC/ p -Si;

б: Ni/ p -SiC/ p -Si;

в: p -SiC/ p -Si.

Случай *б* — попытка металлизации образца никелем.

Ожидаемым результатом было преобразование энергии фотоэлектронов лабораторными гетероструктурами. Конечно, поскольку эти структуры с p - n переходом являются обычными полупроводниками, используемыми в фотовольтаике, то мы наблюдаем световой ток во всех трех случаях. Мы также регистрируем ток в отсутствие света, так называемый темновой ток, и это убедительно демонстрирует работоспособность бета-конвертера. Итак, это

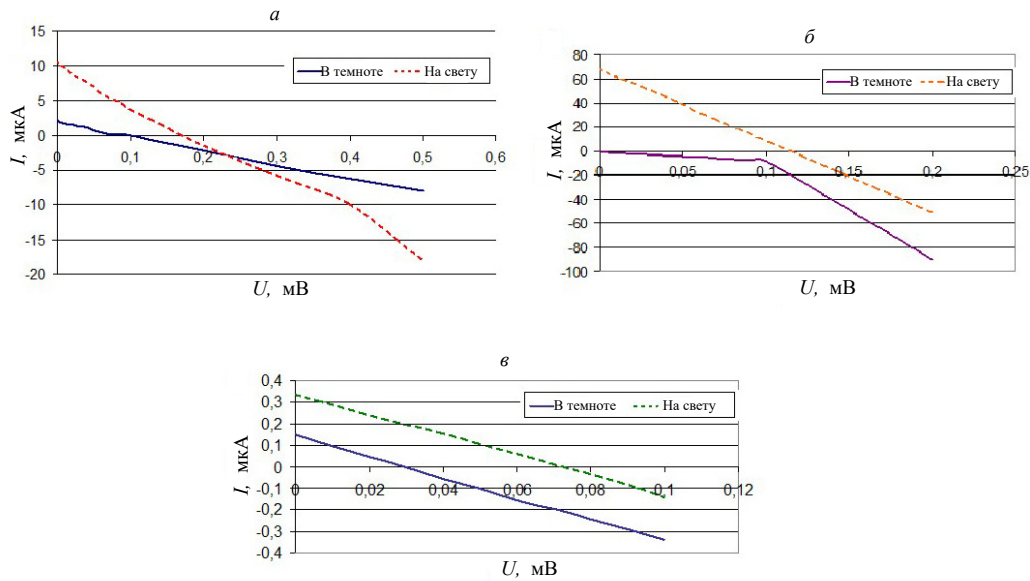


Рис. 1. Вольт–амперные характеристики: *a* — $n\text{-SiC}/p\text{-SiC}/p\text{-Si}$; *b* — $\text{Ni}/p\text{-SiC}/p\text{-Si}$; *c* — $p\text{-SiC}/p\text{-Si}$

работает, как упоминалось выше. Но в втором случае с использованием Ni есть ограничение, обусловленное большим коэффициентом самопоглощения, его зависимостью от толщины.

Чистота поверхности SiC фазы и металлизации может играть значимую роль. Это не обязательно может быть проблемой. Здесь следует учитывать величины работы выхода металла по отношению к полупроводнику для образования выпрямляющего или омического контакта и электронного сродства и ширины запрещенной зоны при наличии механических напряжений, сдвиговых деформаций, дислокаций и дефектов для пленки поверхности полупроводника.

3. ДИФФУЗИЯ И СТРУКТУРНАЯ ЭВОЛЮЦИЯ 3C-SiC/Si

В связи с развивающимися возможностями компьютерных мощностей и методов квантовой химии мы привлекли к нашим исследованиям метод функционала плотности DFT [14, 15]. Это может быть использовано для исследования энергетических преимуществ некоторых структурных фаз, в частности легированных структур. Итак, фаза 3C-SiC была проанализирована методом DFT с легирующими примесями: P, Ga и N. Полное исследование представлено в работе [16]. Основной целью была оценка значения ширины запрещенной зоны в зависимости от числа замещенных атомов в 3C-SiC при высокой степени замещения или концентрации примеси. Эти значения можно сравнивать только между собой в рамках модели, но не с экспериментальными данными. Хорошо известно, что ширина запрещенной зоны E_g в расчетах DFT несколько меньше, чем в реальных измерениях. Результаты представлены в таблице. Одной ячейке соответствовало

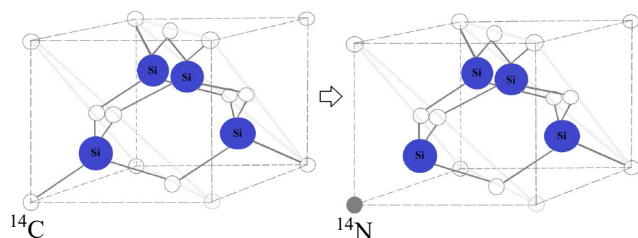
12 атомов. Таким образом, количества замещенных атомов обозначались 1, 2 и 3 из 12.

Другой интересный результат, касающийся так называемой энергии связи, которая имеет положительные значения, в то время как мы ожидаем отрицательные, потому что мы можем сказать, что связь существует, если энергия отрицательна. Значение энергии связи положительно для рассмотренных вариантов замещающих атомов, что означает, что они фактически покидают ячейку SiC при высокой концентрации примеси. Происходит появление вакансий при уходе атомов примеси. Это происходит во время процесса эндотаксии. В этом смысле мы начинаем больше доверять идее диффузии через вакансии, о чем мы говорили выше. Но мы также имеем в виду, что распад ^{14}C приводит к дополнительному появлению атома ^{14}N в положении углерода. Следовательно, описанный ранее процесс продолжается и после эндотаксии. Структура разбивается. Краткая иллюстрация сказанного представлена на рис. 2. Атом ^{14}N не принадлежит клетке, поэтому может покинуть свое положение, а вакансия может быть заполнена другими атомами из ближайшего окружения. Мы предполагаем, что диффузия C-атомов может продолжаться и ^{14}C тоже перенесется. Вывод тут заключается в том, что ^{14}C является подвижным, особенно в подкритическом режиме, когда в случае низкой концентрации он может оставаться подвижным в собственной фазе, то есть не объединяясь в молекулы SiC. Отметим различие утверждений в случае данной работы при исследовании методом DFT отличается от работы [17] и обусловлено целью рассмотрения высокой концентрации примесей. Также, согласно свойству энтропии, в любом случае примесь появится в элементарной ячейке, так как увеличивается свободная энергия Гиббса.

Мы также исследовали зонную структуру полу-

Таблица Ширина запрещенной зоны для ячейки 3C-SiC с разным количеством атомов примеси

Модель	Карбид кремния (ячейка)	+1 Ga	+2 Ga	+3 Ga	+1 P	+2 P	+3 P	+1 H	+2 H	+3 H
<i>E_g</i> , эВ	1.36	1.57	1.87	1.95	1.90	1.67	0.97	2.02	3.88	1.73

Рис. 2. Потеря связи атома азота после распада ^{14}C

проводника. В зонной структуре не появляются новые полосы, но происходит сдвиг энергии Ферми. Это подтверждается аналогичными работами в этой области [18].

4. ГЕНЕРАЦИЯ ЭЛЕКТРОНОВ

Процесс эндотаксии приводит к созданию p - n -перехода за счет донорной и акцепторной примесей. Мы ожидаем, что наличие электрического поля в переходной области приводит к разделению генерируемых электронов и дырок. Мы реализовали моделирование в рамках пакета GEANT [13, 19] для процессов взаимодействия частиц с веществом. В качестве случайной величины определялась точка положения источника бета-излучения ^{14}C . Эта точка находилась в слое карбида кремния (в n -SiC). Направление импульса первичного бета-электрона и его начальная энергия также определяются случайным образом. Образование электронов и дырок происходило в области ОПЗ. Траектории всех электронов отслеживались. Программа позволяла размещать так называемые «детекторы» электронов на различной глубине. Все детекторы располагались на расстоянии 1 мкм друг от друга по мере их заглубления.

Результат был ожидаемым в том смысле, что оптимальная глубина p - n -перехода находится непосредственно под слоем n -SiC с ^{14}C . Важнее всего было оценить корреляцию между шириной зоны ОПЗ и эффективностью ее работы [20]. Обратим внимание, что 10^3 бета-электронов могут создать более миллиона электронно-дырочных пар на глубине 1 мкм. Увеличение ширины ОПЗ на 1 мкм приведет к дополнительной генерации миллионов электронно-дырочных пар. Таким образом, 1 мкм ширины ОПЗ дает увеличение эффективности в среднем на 10%. Далее мы хотели бы объединить наши результаты с теоретическим моделированием процесса эндотаксии, чтобы понять, насколько возмож-

но увеличение ОПЗ.

5. РАДИАЦИОННО-СТИМУЛИРОВАННАЯ ПРИКОНТАКТНАЯ ЗОНА

В процессе эндотаксии на структурном уровне происходит рост монокристаллической пленки, наследующей кристаллографическую ориентацию трансформированной Si-фазы. Анализ технологических и модельных аспектов формирования такой высокотемпературной и радиационноустойчивой гетероструктуры β -SiC/Si с учетом распределения концентраций точечных дефектов различной природы, глубоких центров [16, 21, 22] и моделей их вероятной ассоциации с участием примеси является основным способом повышения надежности датчиков физических величин на их основе. Анализ обратимых ассоциативных процессов открывает пути оптимизации кинетики диффузионного массопереноса и микролегирования при фазовом превращении кремниевой подложки в пленку карбида кремния [22]. Зависимости концентраций нейтральных дефектов от факторов пересыщения газовой фазы условной атомной концентрацией углерода, от концентрации примесей в газовой фазе, а также от собственных дефектов различной природы имеют потенциал для образования глубоких уровней в запрещенной зоне и возможность ассоциации [22]. Эффективность создаваемых структур зависит также от сочетания удельной активности и принципов формирования контактной площадки и металлизации [20], так как термодинамическая работа выхода при легировании радионуклидом становится меньше.

В нашем случае при легировании радионуклидом гетероструктура SiC на подложке Si является комбинированным (фото-)бета-преобразователем энергии электромагнитного излучения и бета-распада. Подложки Si помещают в реактор с высокочастотным нагревом и эпитаксиально наращивают пленку SiC на поверхности Si, в среде водорода методом CVD вводят ^{14}C с ^{12}C в качестве легирующей примеси (1 атом ^{14}C на 100 000 атомов ^{12}C , 10^{18} см^{-3}). Процесс эндотаксии важен на самой ранней стадии изготовления бета-конвертера, когда на кремниевой подложке формируются структуры карбида кремния с молекулами ^{14}C и одновременно создаваемым p - n -переходом или в простом варианте без p - n -перехода, на основе изотипного гетероперехода.

Пленка карбида кремния имеет толщину от 50 нм до 5 мкм, политипную структуру: гексагональную

на подложке из карбида кремния или кубическую на подложке из монокристаллического кремния. Количественный состав соединения стехиометрический или сверхстехиометрический в сторону избытка углерода, в том числе ^{14}C за счет образования собственных точечных дефектов. Исходные данные для исследований и подходы к моделированию определяются индивидуальными технологическими особенностями формирования конструкций. На монокристаллической поверхности кремния n -типа проводимости адсорбируются молекулы углеводородов, которые при температуре 1360°C в среде водорода восстанавливаются до свободного углерода, последний реагирует с кремнием с образованием фазы карбида кремния поли-типа 3C кубической модификации n -типа проводимости (или остается в собственной фазе). Далее следует твердофазный процесс диффузионного превращения поверхностных слоев кремниевой подложки в карбид кремния. Механические напряжения, вызванные несоответствием параметров решеток сопрягаемых фаз (20%), релаксируют с образованием дислокационной сетки в кремниевой фазе, дислокационная сетка перемещается по мере роста слоя карбида кремния, выполняя роль скрытого геттера для легирующей примеси кремния. Если соединение с ^{14}C подмешать в газовую фазу при формировании пленки, он будет внедряться в кристаллическую решетку карбида кремния как легирующая примесь. Вероятно, часть его будет захвачена сеткой дислокаций. Металлургическая граница раздела фаз образует гетеропереход изотипного типа, обычно асимметричный. ОПЗ определяется в основном в Si-фазе. Гетеропереход способен разделять неравновесные носители, природа которых связана с взаимодействием излучения с веществом. Типы структур: $p\text{-SiC}/p\text{-Si}/n\text{-Si}$, $\text{por-}n\text{-SiC}/n\text{-Si}$, $\text{por-}p\text{-SiC}/p\text{-Si}/n\text{-Si}$, $n\text{-}p\text{-SiC}/p\text{-Si}$, $p\text{-}n\text{-SiC}/n\text{-Si}$. Возможна металлизация с барьером Шоттки на SiC и в открытое окно с омическим контактом в Si-фазе при планарном исполнении, металлизация с омическим контактом возможна в планарном исполнении к n - и открытой p -области SiC-фазы.

Следует отметить, что для гетеропереходов эксперимент подтверждает наличие встроенного поля и разделения носителей, а также возможности их аккумуляции и накопления в схеме с усилением на внешних устройствах. Высокая концентрация легирующего ^{14}C может привести к большей концентрации носителей заряда в ОПЗ. Выращенные структуры симметричны относительно подложки, так как пленка SiC-фазы формируется с двух сторон (поэтому планарный вариант преобразователя энергии предпочтительнее). Особенности взаимодействия излучения с веществом гетероперехода или p - n перехода следующие:

1. Энергия электронов спектра бета-излучения будет непосредственно преобразовываться в электрическую энергию, начиная с энергии 7 эВ образования электрон-дырочной па-

ры при ионизационном воздействии.

2. Электроны со средней энергией 49 кэВ поглощаются в координационной сфере вблизи атома ^{14}C , встроенного в элементарную ячейку карбида кремния, радиус сферы определяется диффузионной длиной. Длина свободного пробега бета-электрона на длине поглощения в карбиде кремния составляет до 80 мкм, при этом диффузионная длина порядка до нескольких мкм в карбиде кремния. Толщина пленки карбида кремния зависит от времени выращивания со скоростью 2,5 мкм/час. Радионуклид частично перераспределится в фазу кремния, в части ОПЗ Si-фазы будут генерироваться неравновесные носители.
3. Вероятно, легирование бета-эмиттером влияет на работу выхода электронов из фазы карбида кремния, а если они перераспределяются в фазу кремния, то и на работу выхода из нее. Схемы энергетических зон различных версий должны быть скорректированы с учетом этого предположения.

Оценена зависимость эффективности генерации носителей заряда от активности или введенной концентрации радионуклида в кристаллической решетке с учетом фазообразования. Важно оценить принципиальную возможность металлизации структур с целью сбора неравновесных носителей заряда с учетом изменения в электронном средстве и работе выхода электронов [?]. На данном этапе работы используются чипы структур размером 1×1 мм, увеличение размеров чипа в 10 и более раз не влияет на эффективность преобразования энергии. В то же время важно исследовать степень влияния краевых эффектов. Исследования в рамках данной работы включают также рассмотрение зонных диаграмм устройства гетероструктур, поскольку существует понимание легирующего влияния примесей с радионуклидом на положение энергетических уровней в зонной структуре и на динамику расщепления квазиуровней Ферми.

На подготовленные гетероструктуры тонкой пленки карбида кремния на кремнии КДБ p -типа размерами 10×10 мм и с удельным сопротивлением 6–9 Ом·см (на рис. 3 слева обозначено через $p\text{-Si}$) методом вакуумного напыления при давлении 3×10^{-5} мм.рт.ст. наносили контакты на основе аморфного αGe (300E) и Al (300E). На обратную, тыловую сторону наносили слой Au ($\sim 200\text{E}$), который является контактом. Затем готовые структуры помещали в корпуса (рис. 3).

Кристалл 1 (рис. 3) сажается пресс-формами между двумя коваровыми кольцами, покрытыми компаундом ЭКЛБ-ЮБ для изоляции кристалла от корпуса. Одновременно компаунд ЭКЛБ-ЮБ играет роль склепки.

Таким образом, образуется стабильная выпрямляющая структура, полученная медленным вакуумным напылением химически чистого германия

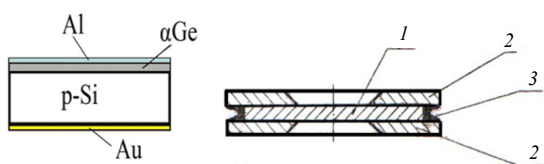


Рис. 3. Схема металлизации структур: 1 — металлизированная гетероструктура карбида кремния на кремнии p -типа, над 1 в центре контакт Al — «выходное» круговое окно или ринговый контакт, под ним аморфный германий (αGe) на карбиде кремния, снизу под кремний контакт Au — «входное» окно, 2 — корпус из материала ковар, 3 — эпоксидная смола ЭКЛБ-10Б

на поверхность SiC с последующим нанесением металлического выпрямляющего контакта на рабочей поверхности и омического контакта на тыльной поверхности. Также отработан и обратный вариант структуры типа ppn .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы резюмировали некоторые наши исследования кубической структуры карбида кремния, полученного в виде фазы в зоне контакта на поверхности кремниевой подложки при эндотаксии. Также мы получили достоверное подтверждение работы бета-конвертера.

Отметим основные тезисы и результаты. Целью исследования являлось рассмотрение особенностей физико-химических процессов в приконтактной области легированной радионуклидом SiC-фазы полупроводника методом твердофазной диффузии атомов ^{14}C , в том числе, исследование: механизма генерации неравновесных носителей, отличительных характеристических особенностей свойств полупроводниковой фазы. Подход DFT-моделирования в данной работе был направлен на получение

доказательств вакансионного, междоузельного или смешанного механизма диффузии при формировании SiC-фазы в Si-подложке. Атомы радионуклида и кремния встречно диффундируют сквозь растущий слой карбида кремния, формируя слои твердофазным химическим превращением кремния n - или p -типа проводимости в структуры анизотипного или изотипного типа проводимости относительно SiC-фазы. Цель данного исследования обусловлена повышением эффективности разделения электрон-дырочных пар.

Полученные результаты состоят в следующем. Мы убедились в обоснованности движения атомов в вакансиях. Подсчет числа электронов помог понять необходимую глубину залегания p - n -перехода в структуре. Эффективность будет увеличиваться с увеличением ширины p - n -перехода до 2 мкм. Этот результат можно совместить с теоретическими расчетами электрического поля. Такие же результаты получены для изотипных и анизотипных гетеропереходов. При этом анизотипный переход приводит к возможно большей концентрации неравновесных носителей заряда в ОПЗ и на интерфейсе. Мы не можем бесконечно увеличивать ширину области ОПЗ. Это не имеет смысла с точки зрения достижения эффективности бета-преобразования энергии и диффузионной длины. Наибольшее количество зарядов будет в области, имеющей толщину 2–4 мкм для гетероперехода. Таким образом, образуется стабильная выпрямляющая структура, полученная медленным вакуумным напылением химически чистого германия на поверхность Si с последующим нанесением металлического контакта на рабочей поверхности и омического контакта на тыльной поверхности.

Частично работа А. В. Гурской была поддержана стипендией президента России 2022 г.

М. В. Долгополов выражает благодарность организаторам международной конференции «ЯДРО–2022» за возможность выступить и обсудить результаты исследования.

- [1] Zhou C. et al. // *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **10**. 027005. (2021).
- [2] Bormashov V. et al. // *Phys. Status Solidi Appl. Mater. Sci.* **212**. 2539. (2015).
- [3] Theirrattanakul S., Prelas M. // *Appl. Radiat. Isot.* **127**. 41. (2017).
- [4] Russo J. et al. // *Appl. Radiat. Isot.* **125**. 66. (2017).
- [5] Liu Y.P. et al. // *Sci. China Technol. Sci.* **60**. 282. (2017).
- [6] Zhang Q. et al. // *Proceedings of the IEEE International Conference on Micro Electro Mechanical Systems*. 1177. (2016).
- [7] Gurskaya A.V., Dolgoplov M.V., Chepurinov V.I. // *Physics of Particles and Nuclei*. **48**, N 6. 941. (2017).
- [8] Shimaoka T. et al. // *Appl. Phys. Lett.* **117**. 103902. (2020).
- [9] Li X. et al. // *Nucl. Sci. Tech.* **31**. 18. (2020).
- [10] Surnin O.L., Chepurinov V.I. // Russian Patent 2733616 C2, 05.10.2020.
- [11] Hong J.D., Davis R.F. // *Journal of the American Ceramic Society*. **63**. 546. (1980).
- [12] Hon M.H., Mater R.F. // *Journal of Materials Science*. **14**. 2411. (1979).
- [13] Dolgoplov M. et al. // *EPJ Web of conferences*. **222**. 02012. (2019).
- [14] Hohenberg P., Kohn W. // *Phys. Rev. B*. **136**. 864. (1964).
- [15] Kohn W., Sham L. // *Phys. Rev.* **140**. A1133. (1965).
- [16] Dolgoplov M.V. et al. // *Journal of Physics: Conference Series*. **1686**(1). 012040. (2020).
- [17] Давыдов С.Ю. // *Физика твердого тела*. **46**, вып. 2. С. 235. (2004). (Davydov S.Y. // *Phys. Solid State*. 2004. **46**. P. 238.)
- [18] Liu N., Wang W., Guo L. // *Modern Physics Letters B*. **31**(12). 1750116. (2017).
- [19] GEANT4 Documentation

- <https://geant4.web.cern.ch>
- [20] *Dolgoplov M.V. et al. // Computational Nanotechnology. 8, N 3. 59. (2021).*
- [21] *Pokoeva V.A., Sivakova K.P. // Physics of Wave Processes and Radio Systems. 10, N 2. 110. (2007).*
- [22] *Чепурнов В.И. // Вестн. СамГУ. Естественнонаучн. сер. № 7(118). С. 145. (2014).*
- [23] *Radzhapov S.A. et al. // Comp. Nanotechnol. № 3. С. 65. (2018).*

Contacts for SiC Nano-Microwatt Energy Converters

A. V. Gurskaya^{1,a}, M. V. Dolgoplov^{1,2,a}, S. A. Rajapov^{3,c}, V. I. Chepurnov^{2,d}

¹*Samara polytech university, Department of Higher Mathematics. Samara 443100, Russia*

²*Samara university, Department of General and Theoretical Physics, Department of Solid-State Physics and Nonequilibrium Systems, Samara 443086, Russia*

³*Physics–Technical Institute of «Physics–Sun» of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Laboratory of Semiconductor high-sensitivity sensors.*

Tashkent, 100084, Uzbekistan

E-mail: ^a a-gurska@yandex.ru, ^b mikhaildolgoplov68@gmail.com, ^c rsafti@mail.ru, ^d chvi44@yandex.ru

The aim of the study is to consider the features of the physico–chemical processes in the near-contact region of the semiconductor SiC phase doped with radionuclide by solid-phase diffusion of ¹⁴C atoms, generation of nonequilibrium carriers and the semiconductor phase distinctive characteristic features. The DFT approach in this paper is aimed at obtaining evidence of the vacancy mechanism of diffusion during the formation of the SiC phase in the Si wafer. Radionuclide and silicon atoms counter-diffuse through a growing layer of silicon carbide, forming layers by solid-phase chemical transformation of silicon of *n*- or *p*-type conductivity into heterostructures of anisotypic or isotypic type of conductivity relative to the SiC phase, with superstoichiometric alloying with conservation of the valence and the type of impurity conductivity, forming, depending on the phase, effects energetically manifested as the effect of «the inner sun», which is the source of electrons and electron–hole pairs at ionization losses. This is due to interactions with the electrons of the shells of neighboring atoms, leading to the formation of electrons and holes in the region of spatial charge and carrying by built-in electric fields. The purpose of the study is due to an increase in the efficiency of separation of electron–hole pairs

PACS: 73.40.Kp, 61.72.Vv.

Keywords: radiation-stimulated contact zone, silicon carbide heterostructures on silicon, microalloying, radionuclide, heteroendotaxy, defect formation, *p–n* junction, CVD.

Received 17 October 2022.

English version: *Moscow University Physics Bulletin. 2023. 78, No. 1. Pp. 14–20.*

Сведения об авторах

1. Гурская Альбина Валентиновна – канд. физ.-мат. наук, доцент, ст. преподаватель; e-mail: a-gurska@yandex.ru.
2. Долгополов Михаил Вячеславович — канд. физ.-мат. наук, доцент; e-mail: mikhaildolgoplov68@gmail.com.
3. Раджапов Сали Аширович — доктор физ.-мат. наук, гл. науч. сотрудник; e-mail: rsafti@mail.ru.
4. Чепурнов Виктор Иванович — канд. техн. наук, доцент; e-mail: dchvi44@yandex.ru.