УДК 538.971

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНЫХ ПАРАМЕТРОВ ТРОЙНЫХ СТЫКОВ СПЕЦИАЛЬНЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН НА ИХ РЕКОМБИНАЦИОННУЮ АКТИВНОСТЬ

© 2022 г. А. Г. Чуешова^{*a*, *, С. М. Пещерова^{*a*}, Л. А. Павлова^{*a*}, А. И. Непомнящих^{*a*}, Е. А. Лудина^{*a*}, Е. Б. Якимов^{*c*}, О. В. Феклисова^{*c*}, Л. И. Федина^{*b*}}

^аИнститут геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН, Иркутск, 664033 Россия ^bИнститут физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, 630090 Россия ^cИнститут проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, Черноголовка, 142432 Россия *e-mail: a.chueshova@igc.irk.ru Поступила в редакцию 25.05.2021 г. После доработки 17.07.2021 г. Принята к публикации 24.07.2021 г.

Геометрические параметры границ зерен, составляющих тройные стыки, и их возможные комбинации изучены методом дифракции обратно рассеянных электронов с помощью программного обеспечения Channel HKL5. Экспериментально показано, что помимо ранее изученных и довольно распространенных тройных стыков специальных границ зерен существуют другие их разновидности. Установлено, что именно в этих тройных стыках нарушается геометрическое правило комбинирования, что может косвенно указывать на рекомбинационную активность специальных границ.

Ключевые слова: мультикристаллический кремний, межзеренные границы, тройные стыки специальных границ зерен, матрица поворота, углы Эйлера, дифракция обратно рассеянных электронов, рекомбинационная активность, метод наведенного тока.

DOI: 10.31857/S1028096022030086

введение

Мультикристаллический кремний — это поликристаллический кремний со столбчатой структурой зерен. Однако между мультикристаллическим и поликристаллическим кремнием существует различие, заключающееся в размерах зерен, которые оказывают влияние на свойства материала. Средний размер зерен поликристалла согласно [1, 2] составляет 0.1—100 мкм, в то время как в мультикремнии это значение может достигать нескольких сантиметров [2, 3]. То есть средний размер зерна поликристаллического кремния намного меньше, чем мультикристаллического. Объект настоящего исследования — мультикремний с крупными зернами.

Тройные стыки границ зерен являются одним из ключевых структурных элементов поликристаллических материалов. Они участвуют в формировании микроструктур и могут влиять на механические и электронные свойства материалов разными способами. В [4–6] было показано, что тройные стыки оказывают сопротивление движению границ зерен, что в свою очередь тормозит рост зерен. Тройные стыки также могут служить в качестве каналов повышенной подвижности для диффузии [7]. Так, автор [8] рассматривает тройные стыки границ зерен как отдельные элементы с различной энергией образования. Линию пересечения трех зерен считают частью общей системы с определенными термодинамическими свойствами, которые приводят к таким наблюдаемым физическим явлениям, как сегрегация примесей на границах зерен в тройных стыках. Еще одна характеристика данной системы описана в [9]. Установлено, что вблизи тройного стыка в процессе кристаллизации появляется так называемый избыточный объем, который "запирается" в стыке. Перечисленные свойства тройных стыков специфичны и не учитываются, если речь идет просто о составляющих их специальных границах. Однако, несмотря на неоспоримое влияние тройных стыков на микроструктуру, в настоящее время количество исследований, посвященных геометрии специальных границ, образующих



Рис. 1. Схематическое представление геометрии тройного стыка границ зерен: $M(\phi_1, \Phi, \phi_2)$ – матрицы поворота, $(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_3)$ – векторы нормали к зернам, α_1 , α_2 , α_3 – двугранные углы.

тройные стыки, минимально [10]. Также остается открытым вопрос об энергии тройных стыков. Исследователи так и не пришли к единому мнению о знаке их удельной энергии [9]. Поэтому несомненный интерес представляет изучение геометрических параметров тройных стыков границ зерен в поликристаллическом кремнии, а также возможные их конфигурации, которые термодинамически выгодны для системы зерна-границы зерен. Так, в [11] показано, что двойники в тройных стыках, которые термодинамически предпочтительны, объединяются по определенным правилам симметрии. Однако даже в случае наиболее распространенного и изученного в поликристаллическом кремнии тройного стыка Σ3–Σ3–Σ9 существуют очевидные противоречия. Во многих работах описывается процесс диссоциации Σ9 на пару когерентных Σ 3 [12–14]. В [15] установлено, что диссоциация границы Σ9 на когерентную Σ3{111} и некогерентную Σ3{112} энергетически выгодна с точки зрения термодинамики, потому что разделение границы Σ9 с высокой энергией на две границы Σ 3 с низкой энергией значительно снизит общую межфазную энергию внутри поликристаллического материала. В настоящей работе исследованы варианты тройных стыков специальных границ, наиболее часто встречающиеся в мультикремнии, а также проведен анализ взаимосвязи рекомбинационной активности и кристаллографических характеристик границ, образующих тройные стыки.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

Геометрия тройных стыков границ зерен

Из всех специальных границ в поликристаллическом кремнии часть их (от 15 до 30%) участвует в образовании тройных стыков. Возможность их образования регламентирована взаимной ориентацией соседних зерен. Тройной стык характеризуется следующими независимыми параметрами: разориентацией, представляющей собой три матрицы поворота M_1, M_2, M_3 , тремя векторами нормали к зернам ($\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_3$) и двугранным углом α (рис. 1). Стоит отметить, что важным параметром является угол, характеризующий взаиморасположение границ зерен в тройном стыке. Принято считать [16], что этот угол определяется энергией границ.

Помимо специальных границ в тройном стыке могут участвовать и случайные границы зерен. Исследование направлено на изучение тройных стыков специальных границ ввиду их геометрических особенностей, соответствующих строго регламентированным правилам стыковки [17], из которых следуют соотношения:

$$\mathbf{M}_{1} = \frac{1}{\Sigma_{1}} \{ a_{ij} \}_{1}, \quad \mathbf{M}_{2} = \frac{1}{\Sigma_{2}} \{ a_{ij} \}_{2}, \quad \mathbf{M}_{3} = \frac{1}{\Sigma_{3}} \{ a_{ij} \}_{3}, \quad (1)$$

где Σ — величина, обратная плотности совпадающих узлов, a_{ii} — элементы матриц.

Одним из представлений матриц поворота является ее определение через углы Эйлера (ϕ_1 , Φ , ϕ_2) [18]:

$$\mathbf{M}(\phi_1, \Phi, \phi_2) = \begin{bmatrix} \cos \phi_1 \cos \phi_2 - \sin \phi_1 \sin \phi_2 \cos \Phi & \sin \phi_1 \cos \phi_2 + \cos \phi_1 \sin \phi_2 \cos \Phi & \sin \phi_2 \sin \Phi \\ \cos \phi_1 \sin \phi_2 - \sin \phi_1 \cos \phi_2 \cos \Phi & -\sin \phi_1 \sin \phi_2 + \cos \phi_1 \cos \phi_2 \cos \Phi & \cos \phi_2 \sin \Phi \\ \sin \phi_1 \sin \Phi & -\cos \phi_1 \sin \Phi & \cos \Phi \end{bmatrix}.$$
(2)

Тогда для кубических кристаллов в тройном стыке зерен (Σ 3, Σ 9, Σ 27) комбинации ориентационных отношений совпадения могут быть получены с помощью уравнения:

$$\mathbf{M}_{1}(\Sigma 3)\mathbf{M}_{2}(\Sigma 9)\mathbf{M}_{3}(\Sigma 27) = \mathbf{I},$$
(3)

где I — единичная матрица. Формулу (3) часто записывают в виде:

$$\mathbf{M}_{1}(\Sigma 3)\mathbf{M}_{2}(\Sigma 9) = \mathbf{M}_{3}(\Sigma 27). \tag{4}$$

Для другой разновидности тройного стыка (Σ 3, Σ 9, Σ 3) выражение будет иметь вид:

ПОВЕРХНОСТЬ. РЕНТГЕНОВСКИЕ, СИНХРОТРОННЫЕ И НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ № 3 2022



Рис. 2. Карта разориентации зерен, представленная в углах Эйлера: а – образец 64н; б – образец 77н. Карта специальных границ: в – образец 64н; г – образец 77н.

$$\mathbf{M}_{1}(\Sigma 3)\mathbf{M}_{2}(\Sigma 9) = \mathbf{M}_{3}(\Sigma 3).$$
 (5)

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Исследование ориентации границ зерен с помощью дифракции обратно рассеянных электронов

С помощью дифракции обратно рассеянных электронов и программного обеспечения Channel HKL5 были исследованы ориентации специальных границ зерен в тройных стыках, а также их комбинации, которые удовлетворяют правилу (3). Анализ ориентационных соотношений специальных границ зерен в тройном стыке, а также вычисление кристаллографических параметров для каждой границы зерен проведены методом построения матриц поворота по заложенным в Channel HKL5 углам Эйлера (2). Ниже представлены данные о кристаллографических параметрах границ зерен, образующих тройные стыки (рис. 2, табл. 1).

Исходя из табл. 1 и рис. 2 понятно, что данные тройные стыки нельзя объединить в группы по углам разориентации и осям вращения. Например, зерна 13–15 и 1–3, а также 10–12 образуют тройной стык $\Sigma 3(146^{\circ}[113]) - \Sigma 3(179^{\circ}[112]) \Sigma 9(39^{\circ}[011])$. Такой же вид тройного стыка ($\Sigma 3 \Sigma 3 - \Sigma 9$), но с другими структурными параметрами ($70^{\circ}[011]$)– $70^{\circ}[011]$ – $119^{\circ}[115]$) образуют зерна 7, 8, 10. То же самое можно сказать и о стыке $\Sigma 3 - \Sigma 9 - \Sigma 27$.

Принято считать [19], что границы Σ 3 с параметрами, описанными выше, являются кристаллографически эквивалентными (так же, как и границы Σ 9). Однако не все границы зерен, представленные в табл. 1, образуют тройные стыки, которые удовлетворяют правилу (3). Кроме того, границы, считающиеся эквивалентными, проявляют различные свойства [20]. Следовательно, основная цель настоящего исследования заключалась в том, чтобы установить взаимосвязь между кристаллографическими характеристиками специальных границ зерен в тройных стыках и их вкладом в пространственное распределение скорости рекомбинации.

Исследование рекомбинационной активности границ раздела методом наведенного тока, индуцированного электронами

Исследования методом наведенного тока проводили при комнатной температуре в растровом электронном микроскопе JSM-840A (Jeol) с использованием энергии электронного пучка 35 кэВ и тока пучка 0.1 нА. На образцах мультикремния создавали барьеры Шоттки путем напыления Al на химически полированный образец. Омические контакты создавали, втирая эвтектический

| Nº | Тип границ | ϕ_1 | Φ | φ ₂ | Индексы Миллера | Угол разориентации, град | Ось вращения |
|----|------------|----------|------|----------------|--------------------|-----------------------------|--|
| 3 | Σ9 | 65.2 | 24.7 | 37.6 | 113 | 67.4 | [113] |
| 5 | | 130.8 | 27.5 | 39.6 | 113 | | |
| 3 | Σ27a | 65.2 | 24.7 | 37.6 | 113 | 31 | $[1\overline{2}\overline{1}]$ |
| 4 | | 44.2 | 43.1 | 77.9 | 101 | | |
| 4 | Σ3 | 44.2 | 43.1 | 77.9 | 101 | 60.29 | $[\overline{1}\overline{1}\overline{1}]$ |
| 5 | | 130.8 | 27.5 | 39.6 | 113 | | |
| 3 | Σ3 | 65.2 | 24.7 | 37.6 | 113 | 145.99 | [113] |
| 1 | | 265.8 | 24.6 | 52.4 | 112 | | |
| 3 | Σ3 | 65.2 | 24.7 | 37.6 | 113 | 179.5 | [112] |
| 2 | | 235.8 | 46.3 | 49.5 | 114 | | |
| 2 | Σ9 | 235.8 | 46.3 | 49.5 | 114 | 38 | [011] |
| 1 | | 265.8 | 24.6 | 52.4 | 112 | | |
| 6 | Σ3 | 282.1 | 39.5 | 42.9 | 335 | 146 | [111] |
| 7 | | 68.8 | 50.9 | 42.1 | 566 | | |
| 7 | | 68.8 | 50.9 | 42.1 | 566 | 70 | [011] |
| 8 | Σ3 | 142.7 | 16.4 | 29.1 | 126 | | |
| 7 | Σ3 | 68.8 | 50.9 | 42.1 | 566 | 70 | [011] |
| 10 | | 239.7 | 20 | 52.2 | 14 | | |
| 8 | Σ9 | 142.7 | 16.4 | 29.1 | 126 | 119.4 | [115] |
| 10 | | 239.7 | 20 | 52.2 | 114 | | |
| 10 | Σ3 | 239.7 | 20 | 52.2 | 114 | 179.2 | [112] |
| 12 | | 68.8 | 51.4 | 42.3 | 566 | | |
| 11 | Σ9 | 97.7 | 31.5 | 47.9 | 255 | 38.7 | [011] |
| 12 | | 68.8 | 51.4 | 42.3 | 566 | | |
| 10 | Σ3 | 239.7 | 20 | 52.2 | 114 | 146 | [113] |
| 11 | | 97.7 | 31.5 | 47.9 | 255 | | |
| 13 | Σ9 | 172.3 | 12 | 31.3 | 116 | 39 | [011] |
| 14 | | 118.7 | 32.4 | 53.6 | 326 | | |
| 14 | Σ3 | 118.7 | 32.4 | 53.6 | 326 | 179.88 | [112] |
| 15 | | 312.9 | 38.3 | 36.4 | 346 | | |
| 13 | Σ3 | 172.3 | 12 | 31.3 | 116 | 146.28 | [113] |
| 15 | | 312.9 | 38.3 | 36.4 | 346 | | |

Таблица 1. Кристаллографические параметры границ раздела

Примечание: $\phi_1, \Phi, \phi_2 -$ углы Эйлера, используются для вычисления кристаллографических параметров, связывают системы координат элементарной ячейки кристалла и образца.



Рис. 3. Кристаллографические характеристики межзеренных границ и их взаимосвязь с рекомбинационной активностью в тройных стыках в образцах 64н (а, б) и 77н (в–е): а, в – карты специальных границ; б, г– е – изображения границ в режиме наведенного тока.

сплав Al—Ga с обратной стороны образца. Контраст для оценки рекомбинационной активности определяли с использованием программы для обработки изображений ImageJ с помощью функции измерения интенсивности оттенков серого.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для того, чтобы установить, удовлетворяют ли исследуемые тройные стыки правилу (4), необходимо сравнить матрицу поворота $M(\Sigma 27a)$, построенную по углам Эйлера (2), и матрицу поворота, которая является результатом умножения $M(\Sigma 3)$ и $M(\Sigma 9)$. Если эти матрицы равны, то можно сделать вывод о том, что данный стык границ зерен геометрически правильный и, следовательно, энергетически выгодный для данной системы. На рис. 3 показаны геометрически "правильные" границы зерен, которые образуют довольно распространенные в мультикремнии тройные стыки $\Sigma 3 - \Sigma 9$ и $\Sigma 3 - \Sigma 9 - \Sigma 27$.

Ниже приведен пример матриц для специальных границ зерен в тройных стыках $\Sigma 3 - \Sigma 9 - \Sigma 27a$, $\Sigma 3 - \Sigma 3 - \Sigma 9$ в образцах 77н и 64н:



Рис. 4. Кристаллографические характеристики специальных межзеренных границ: а, в – изображения границ; б, г – изображения тройных стыков в режиме наведенного тока. На вставках вверху – увеличенные изображения тройного стыка границ зерен 3–4–5.

$$\mathbf{M}(\Sigma 27a) = \begin{bmatrix} 23 & 10 & 9.7 \\ 9 & 25 & 2 \\ 9 & -2 & 25 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{M}(\Sigma 3) = \begin{bmatrix} 1.9 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \\ -1 & 2 & -2 \end{bmatrix},$$
(6)
$$\mathbf{M}(\Sigma 9) = \begin{bmatrix} 3.9 & 8 & -1 \\ -6.9 & 3.9 & -4 \\ 4 & -0.9 & 7.9 \end{bmatrix},$$
(7)
$$\mathbf{M}(\Sigma 3) = \begin{bmatrix} -2 & 1 & 2 \\ 1 & -2 & 2 \\ 2 & 2 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{M}(\Sigma 3) = \begin{bmatrix} 1.9 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \\ -1 & 2 & -2 \end{bmatrix},$$
(7)
$$\mathbf{M}(\Sigma 9) = \begin{bmatrix} 7 & 4 & -4 \\ -3 & 7.9 & 1 \\ 4 & 1 & 8 \end{bmatrix}.$$

Существуют и иные варианты матриц, которые отличаются знаками перед матричными элементами. Построенные матрицы поворота соответствуют матрицам, представленным в [17, 21].

Однако не все границы зерен в тройных стыках сочетаются в соответствии с общим правилом $\Sigma 3^n + \Sigma 3^{n+1} = \Sigma 3$ (рис. 4). Например, границы 3– 5–4 и 9–11–10 формируют тройной стык $\Sigma 3-\Sigma 9 \Sigma 9$, а 1–2–4 – стык $\Sigma 3-\Sigma 3-\Sigma 27$. Ранее подобные стыки в поликристаллическом кремнии данным методом не исследовали. Ясно, что матрицы по-

| Тип тройного стыка МЗГ1–МЗГ2–МЗГ3 | Номер МЗГ1 | Номер МЗГ2 | Номер МЗГЗ | Контраст МЗГ1, % | Контраст МЗГ2, % | Контраст МЗГЗ, % |
|--------------------------------------|------------|------------|------------|---------------------|---------------------|---------------------|
| $\Sigma 3 - \Sigma 9 - \Sigma 9$ | 10 | 9 | 11 | 1.8 | 18 | 13.5 |
| Σ3-Σ3-Σ27 | 2 | 4 | 1 | 3 | 9.4 | 26.99 |
| Σ3-Σ3-Σ9 | 7 | 8 | 11 | 1.3 | 1 | 13.5 |
| Σ3-Σ9-Σ9 | 4 | 3 | 5 | 9.4 | 18.16 | 25.18 |
| Σ3-Σ3-Σ9 | 14 | 13 | 12 | 1.1 | 1 | 0.7 |
| $\Sigma 3 - \Sigma 9 - \Sigma 27$ | 15 | 17 | 16 | <1 | <1 | 5.9 |

Таблица 2. Рекомбинационная активность вдоль различных межзеренных границ (МЗГ)

ворота для таких границ не могут комбинироваться.

Чтобы понять, существует ли взаимосвязь между нарушением геометрии тройных стыков, образованных в процессе направленной кристаллизации, и рекомбинационной активностью границ раздела, был вычислен контраст (%) в областях рекомбинационно-активных границ зерен (табл. 2). Как видно из табл. 2, выраженный контраст проявляют границы зерен, тройные стыки которых не удовлетворяют условию (3). Например, в таком стыке контраст границы $\Sigma3$ достигает 9.4%, $\Sigma9 - 25.18\%$, а $\Sigma27 - 26.99\%$. В геометрически правильных границах раздела ситуация иная: $\Sigma3 - 1.3\%$, $\Sigma9 - 13.5\%$, $\Sigma27 - 5.9\%$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Тройные стыки $\Sigma 3 - \Sigma 3 - \Sigma 27$ и $\Sigma 3 - \Sigma 9 - \Sigma 9$, обнаруженные в поликристаллическом кремнии, были исследованы методом анализа матриц поворота. Показано, что в реальных поликристаллах некоторые границы зерен отклоняются от эталонной структуры. Выявлена взаимосвязь между проявлением рекомбинационной активности границ зерен, составляющих тройные стыки, и их кристаллографическими характеристиками. Установлено, что границы зерен в тройных стыках, которые не удовлетворяют основному кристаллографическому правилу их построения, в подавляющем большинстве случаев проявляют высокую рекомбинационную активность.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена в рамках госзаданий ИГХ СО РАН (проект № 0284-2021-0004 "Материалы и технологии для разработки радиационных детекторов, люминофоров и оптических стекол"), ИПТМ РАН (№ 075-00355-21-00) и ИФП СО РАН (№ 0242-2021-0007). **Конфликт интересов:** авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Gestel D. Van, Gordon I., Bender H., Saurel D., Vanacken J., Beaucarne G., Poortmans J. // J. Appl. Phys. 2009. V. 105. № 11. https://doi.org/10.1063/1.3117838
- Forster M., Fourmond E., Lebrun J.-M., Einhaus R., Kraiem J., Lemiti M. New Method for Grain Size Characterization in Multi-Crystalline Ingot // Proc. 24th Eur. Photovoltaic Specialists Conf. Hamburg, 2009. P. 4.
- 3. *Gorka B.* // Genehmigte Dissertation. Hydrogen Passivation of Polycrystalline Si Thin Film Solar Cells. Institut für Silizium-Photovoltaik. Berlin, 2010.
- Czubayko U., Sursaeva V.G., Gottstein G., Shvindlerman L.S. // Acta Mater. 1998. V. 46. P. 5863. https://doi.org/10.1016/S1359-6454(98)00241-9
- Gottstein G., Shvindlerman L.S., Zhao B. // Scripta Mater. 2010. V. 62. P. 914. https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2010.03.017
- Barrales-Mora L.A., Gottstein G., Shvindlerman L.S. // Acta Mater. 2012. V. 60. P. 546. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2011.10.022
- Hirvonen P., Fan Z., Ervasti M.M., Harju A., Elder K.R., Ala-Nissila T. // Sci. Rep. 2017. V. 7. P. 4754. https://doi.org/10.1038/s41598-017-04852-w
- King AH. // Interface Sci. 1999. V. 7. P. 251. https://doi.org/10.1023/A:1008769209265
- 9. Новоселова Д.В., Полетаев Г.М., Кайгородова В.М., Медведева Е.С., Старостенков М.Д. // Вестн. Алтайской науки. 2013. № 1. С. 225. https://doi.org/10.20310/1810-0198-2016-21-3-1191-1194
- 10. *Hardy B.* Generating Triple Junction Distributions. Washington: Washington State University, 2015.
- Komninou Ph., Doni E.G., Karakostas TH., Bleris G.L. // J. Appl. Crystallogr. 1991. V. 24. P. 232. https://doi.org/10.1107/S0021889891000729
- 12. *Randle V., Yan Hu* // J. Mater. Sci. 2005. V. 40. P. 3243. https://doi.org/10.1007/s10853-005-2692-2

- 13. Okada T., Hisazawa H., Iwasaki A., Amimoto S., Miyaji J., Shisawa M., Ueki T. // Mater. Trans. V. 60. № 1. P. 86. https://doi.org/10.2320/matertrans.M2018296
- 14. Hardy G.B., Field D.P. // Acta Mater. 2016. V. 103.
 № 15. P. 809. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2015.10.038
- Chuang L., Maeda K., Shiga K., Morito H., Fujiwara K. // Scripta Mater. 2019. V. 167. P. 46. https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2019.03.037
- 16. Yang C.C., Rollett A.D., Mullins W.W. // Scripta Mater. 2001. V. 44. P. 2735.

 Gertsman V.Y. // Acta Crystallogr. A. 2001. V. 57. P. 369. https://doi.org/10.1107/s0108767301000654

9

- Bunge J. // Texture Analysis in Materials Science. London: Butterworths, 1982. P. 4.
- Morawiec A. // J. Appl. Crystallogr. 2011. V. 44. P. 6. https://doi.org/10.1107/S002188981104310X
- 20. Пещерова С.М., Якимов Е.Б., Непомнящих А.И., Павлова Л.А., Феклисова О.В. // ФТП. Т. 49. Вып. 6. С. 741. https://doi.org/10.1134/S1063782615060196
- 21. Gertsman V.Y. // Acta Crystallogr. A. 2002. V. 58. P. 155.

Influence of Structural Parameters of Triple Junctions of Special Grain Boundaries on Their Recombination Activity

A. G. Chueshova^{1, *}, S. M. Pescherova¹, L. A. Pavlova¹, A. I. Nepomnyashchikh¹, E. A. Ludina¹, E. B. Yakimov³, O. V. Feklisova³, L. I. Fedina²

¹A.P. Vinogradov Institute of Geochemistry, Siberian Branch RAS, Irkutsk, 664033 Russia ²Rzhanov Institute of Semiconductor Physics, Siberian Branch RAS, Novosibirsk, 630090 Russia ³Institute of Microelectronics Technology Problems and High Purity Materials RAS, Chernogolovka, 142432 Russia *e-mail: a.chueshova@igc.irk.ru

The geometric parameters of the grain boundaries that make up the triple joints and their possible combinations are studied by electron backscatter diffraction using the Channel HKL5 software. It has been shown experimentally that, in addition to the previously studied and fairly widespread triple joints of special grain boundaries, there are other varieties of them. It is found that it is at these triple junctions that the geometric combination rule is violated, which may indirectly indicate the recombination activity of special boundaries.

Keywords: multicrystalline silicon, grain boundaries, triple joints of special grain boundaries, rotation matrix, Euler angles, electron backscatter diffraction, recombination activity, electron beam induced current.