

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ BRIEF REPORTS

УДК 53.072:621.315.592

Расчет полос роста в многокомпонентных кристаллах при выращивании методом Бриджмена

В.А. Гончаров, А.В. Васильев

Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

Calculation of Growth Striations in Multicomponent Crystals while Growing by Bridgeman Method

V.A. Goncharov, A.V. Vasiliev

National Research University of Electronic Technology, Moscow

Моделируется процесс выращивания полупроводниковых кристаллов методом Бриджмена с учетом нестационарных воздействий, обусловленных технологическим оборудованием. Проводится сравнение величины микронеоднородности в кристалле с учетом и без учета особенностей многокомпонентности системы.

Ключевые слова: выращивание кристаллов; полосы роста; многокомпонентные системы; задача Стефана.

The model of the process of growing semiconductor crystals by the Bridgeman method with taking into account the non-stationary effect from the technological equipment side has been presented. The comparison of the microhomogeneity value in a crystal with taking into account the multicomponent system peculiarities has been performed.

Keywords: crystal growth; growth striations; multicomponent system; Stefan problem.

Результаты экспериментов по выращиванию кристаллов полупроводников и полупроводниковых соединений показывают, что вертикальный метод Бриджмена при условии незначительности конвекции позволяет получать кристаллы с высоким структурным совершенством. Однако нестационарные воздействия со стороны оборудования приводят к флуктуациям температуры и нарушают технологический процесс. Флуктуации приводят к образованию микроскопических неоднородностей состава кристалла, или полос роста, что оказывает негативное влияние на характеристики полупроводниковых приборов [1].

Математическое моделирование процесса кристаллизации полупроводниковых кристаллов проводится, как правило, на основе численного решения двухфазной задачи Стефана совместно с решением нелинейной системы уравнений Навье–Стокса в расплаве [2, 3]. Так, в работе [2] рассмотрена модель роста кристаллов с учетом погрешности поддержания температуры на нагревателях ΔT от 0,01 до 1 К и неравномерности перемещения тигля с шагом Δh от 0,1 до 50 мкм, что соответствует параметрам ростовых установок на практике. По результатам расчетов сформулированы требования к ростовым установкам для получения необходимых значе-

© В.А. Гончаров, А.В. Васильев, 2016

ний микронеоднородности в кристалле. Следует отметить, что в модели [2] сделано важное ограничение относительно малого содержания легирующей примеси. Это не позволяло проводить прямые расчеты для сложных многокомпонентных соединений.

В настоящей работе рассмотрена модель, являющаяся развитием модели роста кристалла [2], учитывающая концентрационную конвекцию и зависимость параметров системы от состава расплава на основе известных диаграмм состояний.

Во-первых, сформулирована зависимость функции плотности не только от температуры, но и от концентраций компонентов в системе. Разложив плотность в ряд относительно температуры и концентрации примеси, получим

$$\rho(T, C) = \rho_0(T_0, C_0)(1 - \beta_T(T - T_0) + \beta_C(C - C_0)),$$

где ρ_0, T_0, C_0 – характерные плотность, температура и начальная величина примеси в задаче; β_T, β_C – коэффициенты температурного и концентрационного расширения соответственно; $\beta_T = 8 \cdot 10^{-5} \text{K}^{-1}$. Такая формула для плотности применяется в массовой силе уравнения движения. В остальных слагаемых уравнений движения и в других уравнениях положено $\rho = \rho_0$ (приближение Буссинеска). Эффекты концентрационной диффузии и диффузионной теплопроводности не учитываются.

Во-вторых, ввиду оттеснения примеси ее концентрация в расплаве монотонно повышается, что влияет на коэффициент поглощения. Из термодинамического равновесия следует, что должна измениться и температура. Связь между коэффициентом поглощения, температурой и концентрацией найдена для некоторых значений концентраций экспериментально и представлена в графическом виде как диаграмма состояний системы [4]. В приближении регулярных растворов можно получить связь между концентрациями примеси в твердой и жидкой фазах [4], откуда зависимость для неравновесного коэффициента поглощения примеси имеет вид

$$\ln k = \ln \frac{x_{\text{Sb}}^{\text{S}}}{x_{\text{Sb}}^{\text{L}}} = \frac{\Delta S_{\text{Sb}}}{R} \left(\frac{T_{\text{Ge}}^0}{T^{\text{L}}} - 1 \right) + \frac{w_{\text{L}}}{RT^{\text{L}}} (1 - x_{\text{Sb}}^{\text{L}})^2 + \frac{T_{\text{Ge}}^0}{T^{\text{L}}} \ln k_{\text{Sb}}^0 - \frac{w_{\text{L}}^0}{RT^{\text{L}}} = f(x_{\text{Sb}}^{\text{L}}),$$

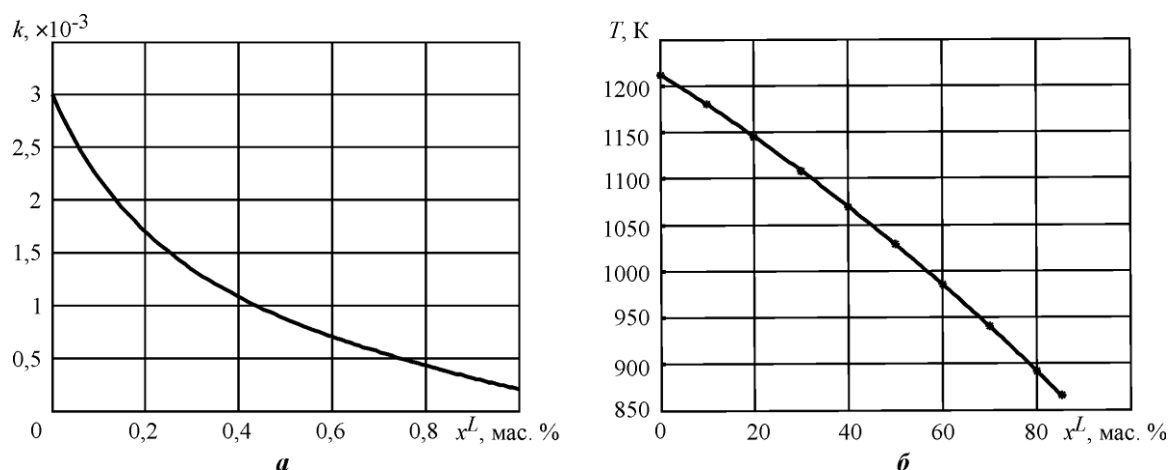
где k_{Sb}^0 – равновесный коэффициент поглощения; x_{Sb}^{L} – концентрация сурьмы в расплаве на фронте кристаллизации (определяется из расчетов на каждом шаге по времени); x_{Sb}^{S} – концентрация сурьмы в кристалле (в расчетах не участвует); ΔS_{Sb} – энтропия плавления чистой сурьмы; R – универсальная газовая постоянная; T_{Ge}^0 – температура плавления чистого германия; T^{L} – текущая температура на фронте кристаллизации, соответствующая текущей концентрации сурьмы ($T(C)$ определяется из диаграммы состояния); w_{L} – энергия смешения ($w(C)$ определяется из диаграммы состояния); w_{L}^0 – энергия смешения в точке чистого Ge (определяется как пересечение зависимости $w(C)$ с осью T_{Ge}^0).

Конкретные значения величин и их размерности приведены в [4] (в настоящей работе они для краткости опущены).

Используя методы аппроксимации, из диаграммы состояния системы $\text{Ge} < \text{Sb}$, приведенной в [5], удастся получить значения коэффициента поглощения и температуры равновесия в зависимости от концентрации сурьмы (рисунок).

Из полученной численной зависимости исследуемых параметров от концентрации сурьмы на фронте кристаллизации видно, что уже при содержании примеси около 1% коэффициент сегрегации сильно изменяется (см. рисунок, а). Зависимость температуры равновесия от концентрации сурьмы почти линейная.

Следует отметить, что с учетом особенностей многокомпонентных систем модель процесса роста кристалла значительно усложняется. Проведенная модификация модели [2] учитывает концентрационную конвекцию и зависимость параметров системы от диаграммы состояния. Сравнительные расчеты по этим моделям задачи приведены в таблице.



Зависимости коэффициента поглощения (а) и температуры равновесия (б) от процентного содержания примеси в расплаве

Зависимость максимальной величины микроскопической неоднородности δC от различных возмущений

Модель	Шаг перемещения тигля Δh , мкм					Амплитуда колебаний ΔT , К			
	0,5	1,0	10	50	100	0,01	0,05	0,1	0,5
[2]	$2 \cdot 10^{-8}$	$3 \cdot 10^{-7}$	$8 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-2}$	$3 \cdot 10^{-5}$	$2 \cdot 10^{-3}$	$7 \cdot 10^{-3}$	$6 \cdot 10^{-2}$
Настоящая работа	$2,5 \cdot 10^{-8}$	$3,2 \cdot 10^{-7}$	$9,1 \cdot 10^{-4}$	$6 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-2}$	$3,4 \cdot 10^{-5}$	$2,2 \cdot 10^{-3}$	$8 \cdot 10^{-3}$	$6 \cdot 10^{-2}$

Примечание: скорость перемещения тигля менялась в диапазоне 0,5 – 10 мм/ч.

Таким образом, при моделировании выращивания кристаллов полупроводниковых соединений методом Бриджмена для получения более точных результатов необходимо учитывать особенности сложных систем.

Литература

1. *Scheel H.J.* Theoretical and technological solution of the striation problem // J. of Crystal Growth. – 2006. – Vol. 287. – N. 2. – P. – 214–223.
2. *Гончаров В.А., Дормидонтов А.Н.* Численное моделирование влияния нестационарных условий на образование концентрационных полос роста при выращивании кристаллов методом Бриджмена // Изв. вузов. Электроника. – 2013. – № 6(104). – С. 3–9.
3. *Балдина Н.А., Васекин Б.В., Гончаров В.А.* Моделирование возникновения аномальной поперечной неоднородности распределения примеси в космических экспериментах по выращиванию кристаллов // Математическое моделирование. – 2009. – Т. 21. – № 10. – С. 67–75.
4. *Глазов В.М., Павлова Л.М.* Химическая термодинамика и фазовые равновесия (двухкомпонентные металлические и полупроводниковые системы). – М.: Металлургия, 1981. – 336 с.
5. Диаграммы состояния двойных металлических систем: справочник: в 3 т. Т.2 / Под общ. ред. Н.П. Лякишева. – М.: Машиностроение, 1997. – 1024 с.

Поступило
9 марта 2016 г.

Гончаров Виктор Анатольевич – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры высшей математики № 1 МИЭТ. *Область научных интересов:* вычислительная математика, математическое моделирование выращивания полупроводниковых кристаллов, исследование полос роста в кристаллах. E-mail: vagonch@gmail.com

Васильев Александр Вячеславович – студент МИЭТ.