

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В ПРОЦЕССЕ РОСТА БЕЗДИСЛОКАЦИОННЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЯ

В.И. Таланин, И.Е. Таланин, А.В. Сирота *Университет государственного и муниципального управления, Украина, 69002, Запорожье, ул. Жуковского 70Б*

Проблема образования ростовых микродефектов (скоплений точечных дефектов) имеет как технологический аспект (управление дефектной структурой кристалла в процессе роста), так и фундаментальное значение, поскольку ее решение позволяет понять физику процесса дефектообразования в сверхчистых бездислокационных монокристаллах кремния.

До настоящего времени решение этой проблемы предлагалось в рамках модели динамики точечных дефектов, которая, в свою очередь, базируется на основных положениях рекомбинационно-диффузионной модели В.В.Воронкова [1]. Предполагая, что процесс дефектообразования обусловлен высокой скоростью рекомбинации между собственными точечными дефектами вблизи фронта кристаллизации и управляется ростовым параметром V/G (где V - скорость роста кристалла, G - осевой температурный градиент), адепты модели динамики точечных дефектов делают попытку связать образование дефектной структуры кристалла с тепловыми процессами, происходящими в расплаве. В рамках этой модели вся номенклатура ростовых микродефектов сводится к двум типам дефектов - вакансионным микропорам и межузельным дислокационным петлям. Ввиду того, что в модели динамики точечных дефектов влияние примеси не учитывается, то, по мнению авторов модели, все типы ростовых дефектов являются различными стадиями развития вакансионных микропор или межузельных дислокационных петель.

В то же время за последние пять лет нами были проведены комплексные экспериментальные исследования малогабаритных бездислокационных монокристаллов кремния, полученных методами Чохральского (CZ-Si) диаметром 50 мм и бестигельной зонной плавки (FZ-Si) диаметром 30 мм. В этих исследованиях с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ТЕМ) была изучена вся номенклатура ростовых микродефектов (за исключением вакансионных микропор); выявлены стандартные картины макрораспределения ростовых микродефектов в зависимости от тепловых условий роста кристалла; прослежена трансформация ростовых микродефектов в ходе различных технологических воздействий; определена физическая природа (знак деформации кристаллической решетки) всех типов ростовых микродефектов; выявлен качественный гетерогенный механизм образования и трансформации ростовых микродефектов [2]. Гетерогенный механизм базируется на экспериментальных результатах и термодинамических расчетах, которые показывают, что процесс агрегации точечных дефектов преобладает над процессом рекомбинации между собственными точечными дефектами. Вклад процесса рекомбинации при высоких температурах незначителен, собственные точечные дефекты сосуществуют в термическом равновесии [3]. Оба вида собственных точечных дефектов участвуют в процессе агрегации одновременно. Обусловленный охлаждением распад пересыщенного твердого раствора точечных дефектов осуществляется по двум механизмам - вакансионному и межузельному, приводя к образованию кислородно-вакансионных и углеродно-межузельных агломератов.

Если движущей силой процесса дефектообразования являются кислородно-вакансионные и углеродно-межузельные агломераты, образующиеся на примесных

центрах вблизи фронта кристаллизации, то его главной особенностью является генерация вторичных дефектов (скоплений собственных точечных дефектов), которой сопровождается рост новой фазы. Генерация скоплений собственных точечных дефектов (вакансионных микропор и межузельных дислокационных петель) происходит во время охлаждения кристалла при температурах ниже 1150 °С [1, 4]. Исходя из указанных различий при образовании дефектов в процессе охлаждения кристалла, мы ввели в рассмотрение физическую классификацию ростовых микродефектов. Физическая классификация оперирует понятиями первичных и вторичных ростовых микродефектов, образование которых базируется на первичном (фундаментальном) взаимодействии «примесь - собственный точечный дефект» и вторичном взаимодействии «собственный точечный дефект - собственный точечный дефект» соответственно [2]. Такое рассмотрение позволяет описывать дефектную структуру кристалла как структуру, состоящую из двух подсистем: подсистема первичных ростовых микродефектов и подсистема вторичных ростовых микродефектов.

Исходя из этих положений, в настоящей работе нами сформулирована математическая модель процесса образования первичных ростовых микродефектов на основе диссоциативного процесса диффузии. Рассмотрены случаи взаимодействия «кислород-вакансия» ($0+V$) и «углерод-собственный межузельный атом кремния» ($C+1$) вблизи фронта кристаллизации для бездислокационных монокристаллов кремния, полученных методами бестигельной зонной плавки и Чохральского. Полученные приближенные аналитические выражения хорошо согласуются с гетерогенным механизмом образования ростовых микродефектов. Предложена модель образования вторичных ростовых микродефектов (вакансионных микропор), которая объясняет причины образования избытка неравновесных вакансий в наблюдаемом температурном интервале 1150...1070°С и отсутствия вакансионных микропор в кристаллах малого диаметра.

В отличие от модели динамики точечных дефектов образование вакансионных микропор в процессе охлаждения кристалла в температурном интервале 1150... 1070 °С связывается с экспериментальными результатами по образованию микродефектной структуры при охлаждении в температурном интервале 1420... 1150 °С. Проведенное рассмотрение вопроса образования вакансионных микропор подтверждает то, что процесс диффузии точечных дефектов в поле температурного градиента лежит в основе дефектообразования в бездислокационных монокристаллах кремния в ходе их роста. При температурах вблизи фронта кристаллизации идет распад пересыщенных твердых растворов примеси (образование первичных ростовых микродефектов), а во время охлаждения кристалла (при $T < 1150$ °С) происходит распад пересыщенных твердых растворов собственных точечных дефектов (образование вторичных ростовых микродефектов). При этом примесные преципитаты служат местами конденсации собственных точечных дефектов.

Таким образом, процесс взаимодействия собственных точечных дефектов с примесями, который начинается вблизи фронта кристаллизации, является фундаментальным (первичным) процессом. Он является определяющим в формировании дефектной структуры высокосовершенных бездислокационных монокристаллов кремния.

- [1] Kulkarni M.S., Voronkov V., Falster R. // J. Electrochem. Soc. 2004. Vol. 151. N 5. P. G663.
- [2] Talanin V.I., Taianin I.E. // Defect & Diffusion Forum. 2004. Vol. 230-232, № 1. P. 177.
- [3] Таланин В.И., Таланин И.Е. // ФТТ. 2007. Т.49, № 3. С. 450.
- [4] Itsumi M. // J. Cryst. Growth. 2002. Vol 237-239, №3. P. 1773.