

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПРИМЕСИ Al В МОНОКРИСТАЛЛАХ Ge-Si, ВЫРАЩЕННЫХ МЕТОДОМ ДВОЙНОЙ ПОДПИТКИ РАСПЛАВА

**З.М. ЗЕЙНАЛОВ\*, С.О. МАМЕДОВА\*, З.М. ЗАХРАБЕКОВА, Г.Х.АЖДАРОВ**

*Институт Физики им. академика Г.М. Абдуллаева НАН Азербайджана,*

*Баку, AZ-1143, пр. Г.Джавида, 33*

*\*Гянджинский Государственный Университет,*

*Гянджа, пр.Шах Исмаила Хатаи, 187*

Ərintini ikiqat qidalanma üsulu ilə alınan germanium-silisiyum bərk məhlul kristallarında alüminium aşqarının paylanmasının riyazi modelləşdirilməsi aparılıb. Göstərilib ki ərintinin kristallaşma və silisiyum və germanium ilə qidalanma sürətlərinin nisbətini idarə etməklə bircinsli Ge-Si kristallarında alüminium aşqarının konsentrasiya qradientini geniş sahədə idarə etmək olar.

Выполнено математическое моделирование распределения примеси алюминия в кристаллах твёрдых растворов германий-кремний, выращенных методом двойной подпитки расплава. Показана возможность управления в широких пределах градиентом концентрации примеси вдоль однородных по составу кристаллов Ge-Si путём изменения соотношений скоростей кристаллизации и подпитывания расплава кремниевым и германиевым стержнями.

A mathematical modeling of Al impurity distribution in germanium-silicon solid solutions crystals grown by the double feeding of the melt method has been carried out. It is shown that the concentration gradient of the impurity in uniform Ge-Si crystals can be changed in a wide range by the rates ratio of the crystallization and feeding of the melt with silicon and germanium rods.

В последние годы были достигнуты значительные успехи в деле выращивания и легирования объёмных кристаллов твёрдых растворов кремний-германий консервативными и неконсервативными методами [1-12]. В стадии изучения находятся вопросы, направленные на получение кристаллов этой системы с заданным концентрационным распределением примеси в матрице. Важность этих исследований связана с тем, что работа многочисленных приборов, лежащих в основе современной микро- и оптоэлектронной промышленности, в подавляющем большинстве случаев определяется внедрёнными в кристалл различными рода примесями. Принимая во внимание то обстоятельство, что основными базовыми материалами полупроводниковой электронной промышленности являются кремний и германий, можно констатировать актуальность исследований по выращиванию легированных монокристаллов их твёрдых растворов для получения материала с требуемыми свойствами.

Распределение ряда типичных мелких примесных центров в кристаллах Si-Ge, выращенных традиционными и модифицированными методами Чохральского, Бриджмена и зонной плавки, было изучено в работах [11-16]. Авторами были определены закономерности изменения коэффициентов сегрегации и аксиального распределения примесей в кристаллах Si-Ge с переменным и постоянным составами.

В настоящей работе решена теоретическая задача по распределению примеси алюминия в однородных монокристаллах Si-Ge, выращенных методом Чохральского в режиме двойной подпитки расплава составными компонентами. Заметим, что алюминий относится к разряду мелких акцепторных примесей в германии, кремнии и их твёрдых растворах и широко используется для легирования этих материалов.

Цель работы состояла в определении оптимальных операционных технологических параметров (стартовый состав расплава и концентрация примеси в нём, соотно-

шения кристаллизации и подпитки расплава германиевым и кремниевым слитками и т.п.) для выращивания однородных монокристаллов системы Si-Ge с заданным составом и концентрационным профилем примеси алюминия.

На рис.1 представлена схема, поясняющая концепцию выращивания и легирования кристаллов твёрдых растворов германий-кремний методом двойной подпитки расплава. С момента начала роста монокристалла из расплава германия с кремнием, в него одновременно с определённой скоростью вводятся стержни из чистого кремния и германия. При соответствующем подборе соотношения скоростей подпитывания и кристаллизации расплава, концентрация основных компонентов в расплаве остаётся постоянной

. В этом режиме происходит рост однородного, по составу основных компонентов, кристалла твёрдого раствора. Состав такого кристалла определяется стартовым соотношением концентраций компонентов в расплаве и соответствующим режимом кристаллизации и подпитки расплава. В работе [17], в пфанновском приближении, получены следующие соотношения, определяющие условие роста однородных кристаллов твёрдых растворов методом двойной подпитки расплава:

$$C_l = \frac{\alpha}{K - 1 + \alpha + \beta} \quad \text{и} \quad C_c = \frac{K\alpha}{K - 1 + \alpha + \beta} \quad (1)$$

Здесь  $C_l$ ,  $C_c$  - атомные доли кремния в расплаве и кристалле соответственно;  $K = C_c/C_l$  - равновесный коэффициент сегрегации второго компонента (кремния);  $\alpha$  и  $\beta$  соотношение скоростей подпитывания расплава вторым (Si) и первым (Ge) компонентами к скорости кристаллизации расплава.

Уравнения (1) показывают возможность роста полностью однородных монокристаллов твёрдых растворов при всех, остающихся постоянными, значениях параметров  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $K > 1$ .

В основу решения задачи математического описания концентрационного распределения примесей Al в кристалле Ge-Si, выращенном методом двойной подпитки расплава была заложена схема, представленная на рис. 1, отображающая стартовую позицию роста кристалла. Задачу решали при выполнении следующих стандартных условий: на фронте кристаллизации существует равновесие между твёрдой и жидкой фазами; фронт кристаллизации плоский; диффузия примеси и конвекция в расплаве обеспечивают однородность жидкой фазы по всему объёму как по отношению к примеси, так и основных составных компонентов; диффузия атомов примеси в твёрдой фазе пренебрежимо мала.

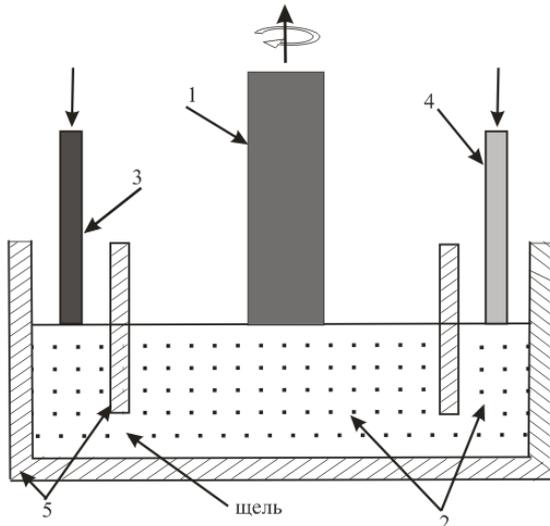


Рис.1. Схема выращивания легированных монокристаллов твёрдых растворов германий-кремний методом двойной подпитки расплава. 1- растущий монокристалл; 2- расплав Ge-Si<Al>; 3, 4 -подпитывающие слитки из Ge и Si; 5- тигель.

Введём следующие обозначения:  $V_l^0, V_l$  - объёмы расплава в тигле в начальный и текущий моменты;  $V_c$ - объём кристаллизующегося расплава в единицу времени;  $V_{Si}, V_{Ge}$  - объёмы подпитывающих слитков из кремния и германия, вводимые в расплав в единицу времени;  $C_l^{0,im}, C_l^{im}$  - концентрации примеси в расплаве в начальный и текущий моменты;  $C_c^{im}$  - концентрация примеси в растущем кристалле;  $C^{im}$  - общее количество примеси в расплаве;  $K_{im}^x = C_c^{im} / C_l^{im}$  - равновесный коэффициент сегрегации примеси, зависящий от состава кристалла (x). С принятыми обозначениями имеем:

$$C_l^{im} = \frac{C^{im}}{V_l}, \quad \frac{dC_l^{im}}{dt} = \frac{\dot{C}^{im}V_l - \dot{V}_l C^{im}}{V_l^2} = \frac{\dot{C}^{im} - \dot{V}_l C_l^{im}}{V_l} \quad (2)$$

Принимая по условию задачи, что  $V_{Si}, V_{Ge}$  и  $V_c$  не зависят от времени, имеем

$$\begin{aligned} V_l &= V_l^0 - (V_c - V_{Si} - V_{Ge})t, \\ \dot{V}_l &= -V_c + (V_{Si} + V_{Ge}), \\ \dot{C}^{im} &= -V_c C_l^{im} K_{im}^x \end{aligned} \quad (3)$$

Подставляя (3) в (2) после разделения переменных и интегрирования имеем

$$\frac{V_c - V_{Si}}{V_c - V_c K_{im}^x - V_{Si} C_l^{0,im}} \int_{C_l^{im}}^{C_l^{0,im}} \frac{dC_l^{im}}{C_l^{im}} = \int_0^t \frac{dt(V_c - V_{Ge} - V_{Si})}{V_l^0} \left/ \left[ 1 - \frac{(V_c - V_l)}{V_l^0} \right] \right. \quad (4)$$

Введя обозначения  $\gamma = V_c t / V_0$ ,  $\alpha = V_{Si} / V_c$ ,  $\beta = V_{Ge} / V_c$  из (4) в конечном варианте имеем

$$C_c^{im} = C_l^{im} K_{im}^x = C_l^{0,im} K_{im}^x [1 - \gamma(1 - \alpha - \beta)]^{\frac{(K_{im}^x + \alpha + \beta - 1)}{(1 - \alpha - \beta)}} \quad (5)$$

Уравнение (5) позволяет определить концентрацию примеси вдоль кристалла, выращенного методом двойной подпитки расплава, при известных значениях  $C_l^{0,im}$ ,  $K_{im}^x$ ,  $\alpha$  и  $\beta$ .

На рис. 2 для примера представлены характерные кривые зависимости концентрации примеси алюминия вдоль кристалла с 30 ат.% Si, выращенного из расплава методом двойной подпитки. Расчёты проведены при выполнении условий определяемых соответственно уравнениями (1) и (4) при различных режимах подпитывания расплава.

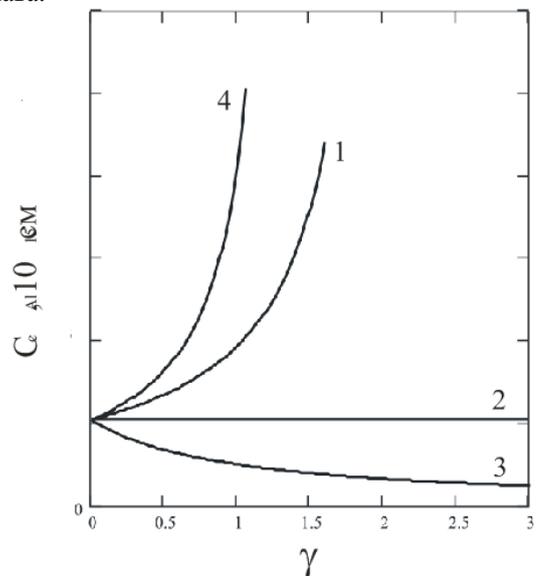


Рис.2. Концентрационный профиль примеси алюминия в кристалле  $Ge_{0.7}Si_{0.3}$ , выращенном из расплава методом двойной подпитки (кривые 1-3) и из расплава подпитываемого кремнием (кривая 4). 1-  $\alpha + \beta = 0,5$ ,  $\alpha = 0,255$ ; 2-  $\alpha + \beta = 1$ ,  $\alpha = 0,3$ ; 3-  $\alpha + \beta = 2$ ,  $\alpha = 0,391$ ; 4-  $\alpha = 0,23$ ,  $\beta = 0$ ;  $C_l^{0,Al} = 1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ;  $K_{Al}^{0,3} = 5,2 \cdot 10^{-2}$ .

Стартовая концентрация примеси алюминия во всех режимах принята равной  $C_1^{0,Al}=1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ . Значение коэффициента сегрегации примеси, соответствующее заданному составу кристалла, определили из данных [15,16], согласно которым  $K_{Al}$  изменяется линейно с концентрацией кремния в матрице между значениями в германии (0,073) и кремнии (0,002). Значения параметров  $\alpha$  и  $\beta$ , определённые из условия роста однородного кристалла с заданным содержанием основных компонентов ( $\text{Ge}_{0,7}\text{Si}_{0,3}$ ), представлены в подрисуночной записи. Как видно, в частном случае метода двойной подпитки расплава, когда  $\beta=0$  и расплав подпитывается только кремнием, имеет место непрерывный рост концентраций примесей алюминия по длине кристалла вплоть до его конечной части. Очевидно, что управление градиентом концентрации примеси по длине кристалла, при заданном значении  $\alpha$ , здесь можно осуществить только изменением диаметра растущего кристалла. Как видно из рис.2 в случае двойной подпитки расплава возникает

возможность, позволяющая управлять градиентом концентрации примеси путём одновременного изменения параметров  $\alpha$  и  $\beta$ . При этом соответствующие значения этих параметров должны удовлетворять уравнению (1) для заданного состава основных компонентов кристалла. Представленные на рисунке примеры демонстрируют, возможность получения кристаллов германий-кремний с заданным градиентом концентраций примеси, включая его равенство нулю, соответствующее однородному распределению примеси по всему объёму кристалла.

На основе вышеизложенного материала, можно сделать следующее заключение. Математическое моделирование распределения примеси алюминия в кристаллах германий-кремний показывает, что модернизированный метод Чохральского, с использованием двойной подпитки расплава его составными компонентами, может успешно применяться для получения кристаллов твёрдых растворов с заданным аксиальным распределением примеси, включая однородное.

- 
- [1]. *G.Kh.Azhdarov, T. Kucukomeroglu, A. Varilci et. al.:* J. Crystal Growth, 226, 2001, 437.
- [2]. *I.Yonenaga:* J. Crystal Growth, 198/199, 1999, 404.
- [3]. *I.Yonenaga:* J. Crystal Growth, 226, 2001, 47.
- [4]. *N.V.Abrosimov, S.N.Rossolenko, W.Thieme. et. al.:* J. Crystal Growth, 174, 1997, 182.
- [5]. *П.Г.Аждаров, Н.А.Агаев:* Неорганические материалы, 35, 1999, №8. 763.
- [6]. *C. Marin, A.G. Ostrogorsky:* J. Crystal Growth, 211, 2000, 378.
- [7]. *K. Kadakura, Y.Takano:* J. Crystal Growth, 171, 1997, 56.
- [8]. *D.Bliss, B.Demczyk, B.Anselmo et. al.:* J. Crystal Growth, 174, 1997, 187.
- [9]. *T.A.Campbell, M.Schweizer, P. Dold et. al.:* J. Crystal Growth, 226, 2001, 231.
- [10]. *K.Nakajima, S.Kodama, S.Miyashita et. al.:* J. Crystal Growth, 205, 1999, 270.
- [11]. *P.Dold, Barz A., Recha S. et. al.:* J. Crystal Growth, 192, 1998, 125.
- [12]. *Barz A., P.Dold, U.Kerat et. al.:* J. Vac. Sci. Technol. B., Microelectron Nanometer Struct., 16, 1998, 1627.
- [13]. *I.Yonenaga, T. Ayuzava:* J. Crystal Growth, 297, 2006, 14.
- [14]. *Bok-Cheol Sim, Kwang Kim, Hong-Woo Lee:* J. Crystal Growth, 290, 2006, 665.
- [15]. *З.М.Захрабекова, З.М.Зейналов, В.К.Кязимова, Г.Х. Аждаров:* Неорганические материалы, 43, 2007, №1, 5.
- [16]. *V.K.Kyazimova, Z.M. Zeynalov, Z.M.Zakhrabekova, G.Kh .Azhdarov:* Crystallography Reports, 1, 2006, №1, 192.
- [17]. *Г.Х.Аждаров, С.М.Багирова, К.Н. Мамедов:* Изв. НАН Азерб. Серия физ.-мат. и тех.наук, 23, 2007, №2, 35.