

**РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПРИМЕСИ АЛЮМИНИЯ ВДОЛЬ ОДНОРОДНЫХ
КРИСТАЛЛОВ Ge-Si, ВЫРАЩЕННЫХ МОДЕРНИЗИРОВАННЫМ
МЕТОДОМ ЧОХРАЛЬСКОГО С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
ПОДПИТЫВАЮЩЕГО СЛИТКА КРЕМНИЯ**

З.М.ЗАХРАБЕКОВА, З.М.ЗЕЙНАЛОВ*, Г.Х.АЖДАРОВ

*Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, Баку, пр. Г.Джавида, 33
Гянджинский Государственный Университет*
AZ 4707, г.Гянджа*

В пфанновском приближении решена задача распределения примеси алюминия в однородных монокристаллах Ge-Si, выращенных методом Чохральского в режиме непрерывной подпитки расплава кремнием. Построено семейство кривых, демонстрирующее существенное влияние зависимости коэффициента сегрегации примеси от состава кристалла и изменения объема расплава, связанного с его подпиткой, на концентрацию алюминия вдоль оси кристаллизации слитка твердого раствора.

Алюминий как в кремнии, так и в германии относится к разряду легкоионизируемых примесных центров. Обладая достаточно высокой растворимостью в Si и Ge, лежащей в пределах $10^{19} \div 10^{20} \text{ см}^{-3}$ [1], примесь алюминия определяет электронные свойства этих полупроводников в широкой области температур. Равновесный коэффициент распределения алюминия при температуре кристаллизации кремния и германия составляет $7,3 \cdot 10^{-2}$ в Si и $2 \cdot 10^{-3}$ соответственно Ge [2-4]. Такие малые значения K_{Al} приводят к существенному градиенту концентрации примеси вдоль оси кристаллизации в слитках Si и Ge, выращенных традиционным методом Чохральского. Определяющая роль концентрации примесных центров в формировании электронных свойств полупроводников ставит задачи, связанные с исследованием распределения примесных центров в кристаллах, в разряд важнейших. В различных приближениях эти задачи решены достаточно полно для простых полупроводников.

В настоящей работе в пфанновском приближении и в рамках модели виртуального кристалла для твердых растворов решена задача распределения примеси Al в однородных кристаллах Ge-Si, выращенных методом Чохральского с использованием монокристаллической затравки соответствующего состава и подпитывающего слитка кремния [5,6].

В основу математического моделирования концентрационного распределения примеси алюминия в Ge-Si, выращенном в режиме, обеспечивающем однородность распределения матричных атомов в кристалле, была заложена схема представленная на Рис.1.

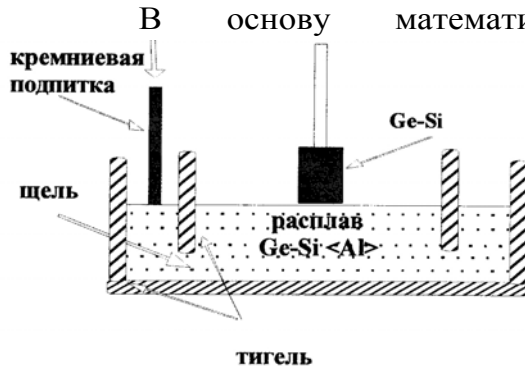


Рис.1.

Схематическое изображение стартовой позиции выращивания легированного однородного монокристалла Ge-Si<Al> с использованием подпитывающего слитка кремния.

Вначале, после расплавления в тигле загрузки из Ge, Si и примеси Al с соответствующим соотношением компонентов и установления температуры ликвидуса заданного состава расплава Ge-Si, подпитывающий слиток кремния и

затравка приводятся в соприкосновение с поверхностью расплава. Затем, по истечению определенного стабилизационного времени одновременно включаются механизмы вытягивания кристалла и погружения подпитки в расплав. Рост однородного кристалла с заданным соотношением концентраций атомов Ge и Si производится путём поддержания достигнутой температуры на фронте кристаллизации за счёт балансировки состава расплава соответствующим соотношением скоростей его кристаллизации и подпитывания [6].

Задачу распределения примеси алюминия в кристаллах Ge-Si, выращенных этим методом, решали в пфанновском приближении при выполнении следующих условий: на фронте кристаллизации существует равновесие между твёрдой и жидкой фазами; фронт кристаллизации плоский; диффузия примеси алюминия и конвекция в расплаве обеспечивают однородность жидкой фазы по всему объёму; диффузия атомов алюминия в твёрдой фазе пренебрежимо мала. Отметим, что для системы Ge-Si эти условия выполняются практически при скоростях роста кристалла менее $1 \cdot 10^{-6}$ м/с [7].

Введём следующие обозначения: V_l^0 , V_l – объёмы расплава в тигле в начальный и текущий моменты; V_c , V_{Si} – объёмы кристаллизующегося расплава и растворяющегося кремниевого стержня в единицу времени; C_l^0 , C_l – концентрации примеси Al в расплаве в начальный и текущий моменты; C_c – концентрация примеси Al в твёрдой фазе; C – общее количество примеси алюминия в расплаве; $K_{Al} = C_c / C_l$ – равновесный коэффициент сегрегации алюминия; t – время. С принятыми выше обозначениями имеем

$$C_l = \frac{C}{V_l} \quad \text{и} \quad \frac{dC_l}{dt} = \frac{\dot{C}V_l - \dot{V}_l C}{V_l^2} = \frac{\dot{C} - \dot{V}_l C_l}{V_l} \quad (1)$$

Принимая, что в рассматриваемый период V_c и V_{Si} не зависят от времени, имеем

$$V_l = V_l^0 - (V_c - V_{Si})t, \quad \dot{V}_l = -V_c + V_{Si} \quad \text{и} \quad \dot{C} = -V_c C_l K_{Al} \quad (2)$$

Подставляя в (1) данные (2), после разделения переменных и интегрирования, находим

$$\frac{V_c - V_{Si}}{V_c - V_c K_{Al} - V_{Si}} \int_{C_l^0}^{C_l} \frac{dC_l}{C_l} = \int_0^t \frac{dt(V_c - V_{Si})}{V_l^0 - (V_c - V_{Si})t} \quad (3)$$

Введя в (3) обозначения $V_{Si}/V_c = \alpha$; $V_c t / V_l^0 = \gamma$, после интегрирования будем иметь

$$C_c = C_l K_{Al} = C_l^0 K_{Al} [1 - \gamma(1 - \alpha)]^{\frac{(K_{Al} + \alpha - 1)}{(1 - \alpha)}} \quad (4)$$

Уравнение (4) позволяет определить концентрацию примеси алюминия в зависимости от γ , т.е. от длины кристалла при известных значениях K_{Al} и α . В рамках модели виртуального кристалла для твёрдых растворов считаем, что K_{Al} зависит линейно от концентрации кремния в кристалле, что позволяет определить этот коэффициент для любого состава твёрдого раствора по известным данным K_{Al} в германии и кремнии. Экспериментальные данные работы [2] по определению K_{Al} в одном из составов Ge-Si подтверждают корректность принятого нами приближения. Значение $V_{Si}/V_c = \alpha$ в уравнении (4) определяем из условия роста полностью однородных кристаллов твёрдых растворов Ge-Si в режиме

непрерывной подпитки расплава кремнием. Для этого случая должно соблюдаться следующее соотношение [6]:

$$C_l^{Si} = \frac{\alpha}{K_{Si} - 1 + \alpha} \quad \text{или} \quad C_c^{Si} = \frac{K_{Si}\alpha}{K_{Si} - 1 + \alpha}, \quad (5)$$

здесь C_l^{Si} и C_c^{Si} - концентрации кремния в расплаве и растущем однородном кристалле, соответственно, K_{Si} -коэффициент сегрегации кремния в заданном составе. Уравнение (5) даёт возможность определить значение α для любого заданного C_l^{Si} или C_c^{Si} . При этом, соответствующее значение K_{Si} вычисляется из фазовой диаграммы состояния системы Ge-Si. На Рис.2 представлены вычисленные таким образом значения K_{Si} в зависимости от состава жидкой и твёрдой фаз системы.

Рис.3 демонстрирует расчётные кривые зависимости концентрации алюминия вдоль кристаллов Ge-Si с содержанием кремния 5, 10, 20, 40 и 80 ат.% Si, рассчитанные из уравнения (4) с использованием соответствующих значений α и K_{Si} по данным (5) и рис.2. Для всех кристаллов начальная концентрация алюминия в расплаве принята равной $C_l^0 = 1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

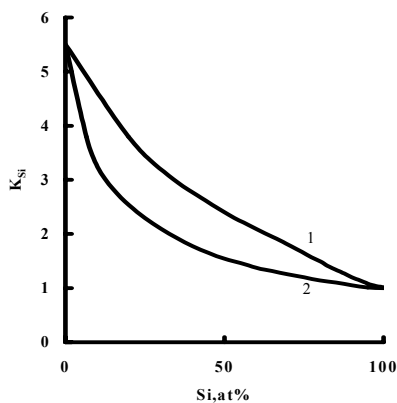


Рис.2.

Зависимости равновесного коэффициента сегрегации кремния от состава твёрдой (1) и жидкой (2) фаз системы Ge-Si, рассчитанные из фазовой диаграммы состояния [1].

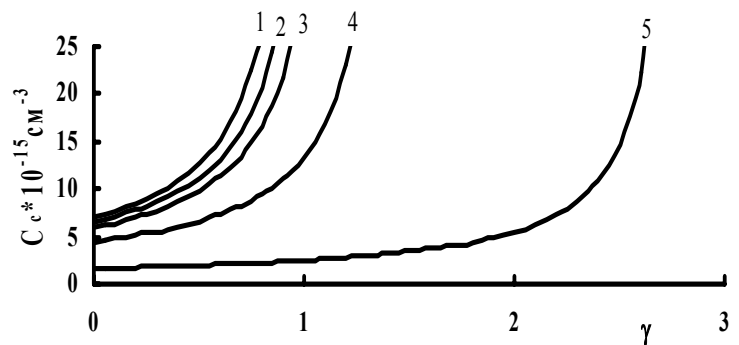


Рис.3.

Зависимости концентрации примеси алюминия от γ в однородных кристаллах Ge-Si, выращенных модернизированным методом Чохральского с использованием подпитывающего слитка кремния. Кривые 1,2,3,4 и 5 относятся к кристаллам с содержанием кремния 5, 10, 20, 40 и 80 ат.%, соответственно.

Как видно из Рис.3, скорость роста концентрации примеси алюминия по длине кристалла существенно уменьшается с увеличением содержания кремния в матрице. Такое поведение объясняется, с одной стороны, уменьшением коэффициента сегрегации алюминия с ростом концентрации кремния в расплаве, с другой, увеличением объёма расплава, обусловленным его подпитыванием кремнием. Закономерное уменьшение концентрации примеси в начальной части кристаллов с увеличением содержания кремния обусловлено с линейным спадом коэффициента разделения алюминия. Обращает на себя внимание практическая неизменность концентрации примеси в достаточно протяжённой области в сплавах с большим содержанием кремния. Такой характер распределения открывает

возможность получения кристаллов Ge-Si с практически равномерным концентрационным профилем примеси алюминия.

Резюмируя вышеизложенное, можно сделать следующее заключение. В однородных монокристаллах твёрдых растворов Ge-Si, выращенных модернизированным методом Чохральского в режиме подпитывания расплава кремнием, на скорость изменения концентрации примеси алюминия вдоль оси кристаллизации существенно влияет зависимость коэффициента сегрегации примеси от состава Ge-Si и изменение объёма расплава, связанное с его подпиткой.

1. В.М.Глазов, В.С.Земсков, *Физико-химические основы легирования полупроводников*, М.: Наука, (1967) 371.
2. Barz, P.Dold, U.Kerat, S.Recha, and K.W.Benz, *Journal of Vac. Sci. Technol.*, **B 16** (1998) 1627.
3. D.T.J.Hurle, *Handbook of Crystal Growth (North-Holland, Amsterdam, 2b* (1994).
4. M.Schulz and H.Weiss, *Landolt-Bornstein, New Series (Springer, Berlin)*, (1984).
5. Г.Х.Аждаров, *Известия ВУЗов России, Материалы электронной техники*, **2** (2004) 47.
6. Г.Х.Аждаров, Р.З.Кязимзаде, *Тезисы док. Национальной конференции по росту кристаллов, Москва*, (2004) 109.
7. G.Kh.Azhdarov, T.Kucukomerogly, A.Varilci, M.Altunbas, A.Kobyas, P. G.Azhdarov. *Journal of Crystal Growth*, **226** (2001) 437.

Si-la QİDALANAN ƏRİNTİDƏN MODERNLƏŞMİŞ ÇOXRALSKI ÜSULU İLƏ ALINAN BİRJİNSLİ Ge-Si KRİSTALLARI BOYUNJA ALİMİNİUM AŞQARININ PAYLANMASI

Z.M.ZÖHRABBƏYOVA, Z.M.ZEYNALOV, H.X.ƏJDƏROV

Pfann yaxınlaşması çərçivəsində modernizə edilmiş Çoxralski üsulu ilə ərintini Si ilə qidalandırma rejimində alınan bircinsli Ge-Si kristallarında aliminium aşqarının paylanma məsələsi nəzəri həll edilib. Qurulan asılılıqlar ailəsi əsasında aşqarın seqreqasiya əmsalının Ge-Si kristalının tərkibindən asılılığı və ərintinin qidalandırma nəticəsində dəyişilən həcmi aşqarın kristal boyunca konsentrasiyasına əhəmiyyətli təsiri göstərilib.

DISTRIBUTION OF Al-IMPURITY ALONG THE Ge-Si UNIFORM CRYSTALS, GROWN BY THE MODIFIED CZOCHRALSKI METHOD USING Si FEEDING ROD

Z.M. ZAKHRABEKOVA, Z.M. ZEYNALOV, H.KH. AZHDAROV

A problem of Al-impurity distribution in fully uniform Ge-Si crystals grown by the modified Czochralski method using Ge-Si seed and Si source crystals has been solved in consideration of the Pfann approximation. On the basis of the calculated curves a considerable influence of the dependence of a segregation coefficient of the impurity on Ge-Si composition and a changing of the melt volume, due to feeding of the melt, on an axial profile of the impurity concentration was shown.

Редактор: Г.Аждаров