

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНЦЕНТРАЦИОННЫХ ПРОФИЛЕЙ ПРИМЕСЕЙ АЛЮМИНИЯ И ИНДИЯ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ГЕРМАНИЙ-КРЕМНИЙ, ВЫРАЩЕННЫХ МЕТОДОМ ДВОЙНОЙ ПОДПИТКИ РАСПЛАВА

З.М. ЗАХРАБЕКОВА, В.К. КЯЗИМОВА, А.И. АЛЕКПЕРОВ, Г.Х. АЖДАРОВ

*Институт Физики НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан*

*E-mail: [zangi@physics.ab.az](mailto:zangi@physics.ab.az)*

В пфанныковом приближении решена одномерная задача по аксиальному распределению примесей Al и In в однородных, по составу основных компонентов, кристаллах твёрдых растворов Ge-Si, выращенных методом двойной подпитки расплава. Результаты математических расчётов демонстрируют возможность управления в широких пределах концентрационным профилем примесей в кристаллах Ge-Si заданного состава, путём соответствующего изменения соотношений скоростей кристаллизации и подпитывания расплава германиевым и кремниевым стержнями. Показана возможность выращивания полностью однородных кристаллов Ge-Si < Al; In >, как по составу основных компонентов, так и по концентрационному профилю примесей.

Ключевые слова: Al, In, монокристалл, твёрдые растворы, пфанныковское приближение.

PACS: 63.20.dk 74.25.Kc

Работа многочисленных приборов, лежащих в основе современной микро- и оптоэлектронной промышленности, в подавляющем большинстве случаев определяется внедрёнными в кристалл различными примесями. Это определяет актуальность работ, направленных на контролируемое легирование полупроводниковых материалов. В последние десятилетия достигнуты определённые успехи при выращивании объёмных монокристаллов твёрдых растворов Ge-Si с заданным концентрационным распределением компонентов и примесей в матрице.

В настоящей работе в пфанныковом приближении решены теоретические задачи по аксиальному распределению примесей алюминия и индия в однородных по составу основных компонентов монокристаллах Si-Ge, выращенных инновационным методом двойной подпитки расплава [1]. Заметим, что Al и In, как в германии и кремнии, так и в их твёрдых растворах относятся к разряду типичных мелких акцепторных примесей и широко используются для легирования этих материалов. Обладая достаточно большой растворимостью в указанных материалах, эти примеси могут изменять их электрические свойства в пределах нескольких порядков.

Цель работы – установление возможностей метода двойной подпитки расплава для выращивания монокристаллов твёрдых растворов  $Ge_xSi_{1-x}$  с заданным составом основных компонентов (x) и аксиальным концентрационным профилем примесей алюминия и индия.

С момента начала роста кристалла из расплава, с заданными соотношением основных компонентов (Ge и Si) и концентрацией примеси (Al или In), в него вводятся стержни из чистого германия и кремния. При соответствующем соотношении скоростей кристаллизации ( $v_c$ ) и подпитки расплава первым ( $v_{f1}$ ) и вторым компонентами ( $v_{f2}$ ), концентрация основных компонентов в расплаве остаётся неизменной. В этом режиме происходит рост кристалла твёрдого раствора Ge-Si с однородным составом основных компонентов. В работе [1], в пфанныковом приближении, получены

следующие соотношения, определяющие условия роста таких кристаллов:

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

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

Уравнения (1) показывают возможность роста однородных монокристаллов твёрдых растворов при  $K > 1$  и соответствующих постоянных значениях параметров  $\alpha$  и  $\beta$ .

Теоретическую задачу аксиального распределения примесей в однородных, по составу основных компонентов, кристаллах твёрдых растворов, выращенных методом двойной подпитки, решали в пфанныковом приближении. Заметим, что для системы Ge-Si результаты этого приближения хорошо согласуются с экспериментальными данными при скоростях роста кристалла  $< 5$  мм/ч.

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 Si и Ge, вводимые в расплав в единицу времени;  $C^{im}$  – общее количество примеси в расплаве;  $C_l^{0,im}, C_l^{im}$  – концентрации примеси в расплаве в начальный и текущий моменты;  $C_c^{im}$  – концентрация примеси в растущем кристалле;

$K_{im}^x = C_c^{im} / C_l^{im}$  - равновесный коэффициент сегрегации примеси, зависящий от состава кристалла (x); t - время. С принятыми обозначениями имеем:

$$C_l^{im} = \frac{c^{im}}{V_l}, \quad \frac{dC_l^{im}}{dt} = \frac{c^{im} - V_l C_l^{im}}{V_l} \quad (2)$$

По условию задачи считаем, что  $V_c$ ,  $V_{Si}$  и  $V_{Ge}$  не зависят от времени и тогда

$$V_l = V_l^0 - (V_c - V_{Si} - V_{Ge})t, \quad \dot{V}_l = -V_c + (V_{Si} + V_{Ge}), \quad (3)$$

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

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

Введя обозначение  $\gamma = V_c t / V_0$ , выражающее долю закристаллизованного расплава в единицах его исходного объёма к моменту t, и используя принятые в (1) обозначения  $\alpha = V_{Si} / V_c$  и  $\beta = V_{Ge} / V_c$ , из (4) после интегрирования и ряда преобразований 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 в единицах  $\gamma$  при известных значениях параметров  $C_l^{0,im}$ ,  $K_{im}^x$ ,  $\alpha$  и  $\beta$ .

Для примера рассмотрим концентрационные профили примесей алюминия и индия в кристаллах Ge-Si, выращенных методом двойной подпитки расплава в различных режимах, обеспечивающих рост твёрдых растворов с составом  $Ge_{0.7}Si_{0.3}$ . На рис.1(a,b) представлены характерные кривые зависимости концентраций примесей Al и In вдоль таких кристаллов. Расчёты проведены для 5-ти различных режимов непрерывного подпитывания расплава германиевым и кремниевым стержнями. Начальные концентрации примесей Al и In в

расплаве, для всех режимов, приняты равными  $1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$  и  $1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  соответственно.

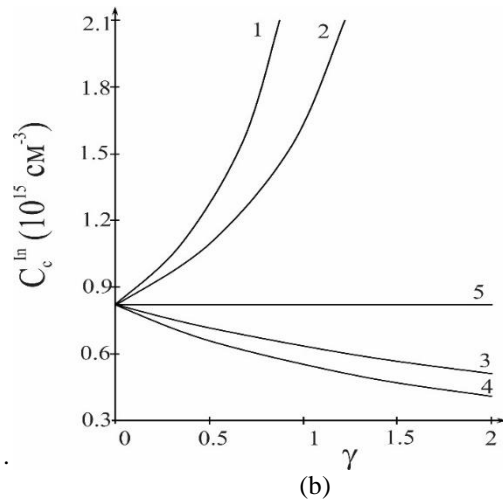
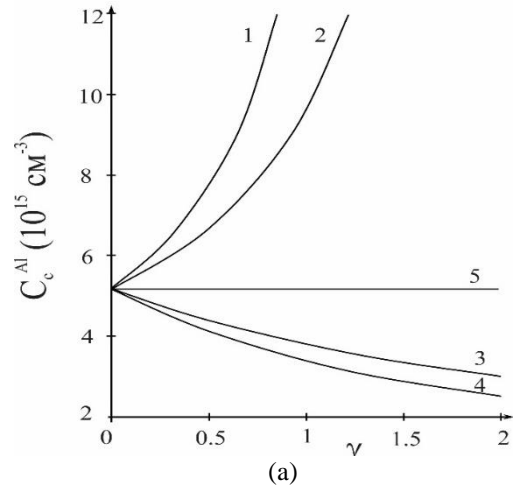


Рис. 1 (a,b). Аксиальное концентрационное распределение примеси алюминия (a) и индия (b) в кристаллах  $Ge_{0.7}Si_{0.3}$ , выращенных методом двойной подпитки расплава, при пяти различных режимах. 1 -  $\alpha + \beta = 0.3, \alpha = 0.237$ ; 2 -  $\alpha + \beta = 0.5, \alpha = 0.255$ ; 3 -  $\alpha + \beta = 1.3, \alpha = 0.328$ ; 4 -  $\alpha + \beta = 1.5, \alpha = 0.346$ ; 5(a) -  $\alpha + \beta = 0.948, \alpha = 0.296$ , 5 (b) -  $\alpha + \beta = 0.999, \alpha = 0.300$

Как видно, метод двойной подпитки расплава даёт уникальную возможность получения объёмных монокристаллов твёрдых растворов с заданным аксиальным распределением, как основных компонентов, так и примесей.

[1] Аждаров Г.Х., Зейналов З.М., Агамалиев З.А., Кязимова А.И. Выращивание монокристаллов полупроводниковых растворов методом двойной подпитки расплава // Кристаллография. 2010. Т. 55. С. 740-743.