

Ю.В. Головка, расист.  
Є.Я. Швець, проф.

Запорізька державна інженерна академія

### МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ РОЗПОДІЛУ ЛЕТУЧОЇ ДОМІШКИ У ПРОЦЕСІ ВИРОЩУВАННЯ МОНОКРИСТАЛІВ КРЕМНІЮ

*Розроблено математичну модель розподілу летучої домішки фосфору в процесі вирощування монокристалів кремнію за методом Чохральського, яка враховує зміну технологічних параметрів протягом процесу вирощування, які впливають на цей розподіл. Модель розв'язано відносно ефективного коефіцієнта розподілу та швидкості випаровування атомів фосфору з поверхні розплаву кремнію.*

**Постановка проблеми.** Монокристали кремнію n-типу провідності широко використовуються для виготовлення інтегральних мікросхем, в тому числі надвеликих і ультравеликих, а також різноманітних напівпровідникових приладів. Наприклад останнім часом на основі n-Si розробляються конденсатори та польові транзистори із паладієвим затвором, що служать сенсорами аміаку [1]. Світова мікроелектронна промисловість виготовляє монокристали n-кремнію вирощуванням з розплаву за методом Чохральського з легуванням їх фосфором. Управління концентрацією фосфору під час вирощування монокристалів кремнію залишається актуальним завданням.

Для управління концентрацією фосфору у вирощуваному монокристалі кремнію необхідно знати величини ефективного коефіцієнта розподілу фосфору та швидкості його випаровування з розплаву кремнію. Однак в промислових установках для вирощування монокристалів за методом Чохральського ці фізичні параметри неможливо виміряти безпосередньо. Тому для оптимізації технології вирощування монокристалів кремнію актуально використання таких досліджень, що базуються на математичному моделюванні фізичних параметрів процесів, які відбуваються під час вирощування монокристалів кремнію.

**Аналіз останніх досліджень.** Вхідження домішки з розплаву у тверду фазу в процесі кристалізації прийнято характеризувати ефективним коефіцієнтом розподілу домішки:

$$k_p = \frac{\gamma_p}{\gamma_{me}} \cdot \frac{N_{me}}{N_p}, \quad (1)$$

де  $k_p$  – ефективний коефіцієнт розподілу домішки фосфору;  $\gamma_p$  і  $\gamma_{me}$  – густина рідкої і твердої фаз, г/см<sup>3</sup>,  $N_{me}$  і  $N_p$  – густина атомів домішки відповідно у твердій і рідкій фазах, ат/см<sup>3</sup>.

Експериментальне визначення величини ефективного коефіцієнта розподілу домішки безпосередньо за допомогою виразу (1) можливо в лабораторних умовах. Але внаслідок суттєвої залежності величини  $k$  від умов вирощування набуті в такий спосіб дані можна використати для промислових умов тільки для грубих оцінок. Визначити величину  $k$  для різних значень частки розплаву, що закристалізувалася,  $g$  за допомогою виразу (1) в промислових умовах є технічно нездійсненним. Задля цього було б необхідно багаторазово переривати процес вирощування, охолоджувати кристал і розплав, розгерметизувати ростову камеру, вимірювати концентрацію домішки в розплаві й кристал. Потім потрібно знову ввести кристал в камеру, розплавляти кремній в тиглі, вводити в розплав кінцевий перетин кристала й поновлювати процес вирощування. Якби це й здійснити, то внаслідок теплового удару в момент контакту з розплавом нижньої поверхні кристала в ньому утворилася б величезна кількість лінійних структурних дефектів – дислокацій. Далі відбувалося б у кращому випадку вирощування монокристала з великою густиною дислокацій, а найімовірніше – полікристала. Якщо ж кожного разу послідовно вирощувати новий монокристал, то отримані результати також будуть викривлені внаслідок того, що при кожній розгерметизації кремній у тиглі буде забруднюватись через взаємодію з атмосферою.

Таким чином, безпосередньо з визначення ефективного коефіцієнта розподілу домішки (1) не можливо визначити такі значення ефективного коефіцієнта розподілу домішки  $k_p$  і швидкості її випаровування  $w_p$ , що є реальними для промислових умов вирощування монокристалів кремнію за методом Чохральського.

В роботах [2, 3] запропонований новий підхід до визначення реальної величини ефективного коефіцієнта розподілу домішки, що ґрунтується на математичному моделюванні масообміну домішки в процесі кристалізації. Для нелетучої домішки бору в кремнії в роботі [2] розроблено математичну модель розподілу домішки між рідкою і твердою фазами в процесі вирощування монокристала, що ґрунтується на рівнянні балансу її атомів. Для нелетучої домішки вуглецю в роботі [3] розроблено математичну модель розподілу, що також ґрунтується на рівнянні балансу її атомів з урахуванням додаткового надходження атомів вуглецю до розплаву через атмосферу робочої камери від графітових

елементів теплового вузла. За допомогою розроблених моделей в роботах [2, 3] за експериментальними даними концентрації домішок у вирощеному монокристалі були визначені величини ефективних коефіцієнтів розподілу відповідних домішок і швидкості надходження атомів вуглецю до розплаву через атмосферу робочої камери.

Для летучих домішок на даний момент не розроблені такі математичної моделі, що дозволили б визначити реальні для промислових умов вирощування монокристалів кремнію за методом Чохральського значення ефективного коефіцієнта розподілу і швидкості їхнього випаровування з розплаву.

**Мета роботи** – побудова такої математичної моделі розподілу летучої домішки фосфору під час вирощування монокристала кремнію, яка дозволяє за даними стандартного в промислових умовах контролю концентрації фосфору у вирощеному монокристалі кремнію оцінити величину фізичних параметрів, що є необхідними для оптимізації технологічного процесу: ефективного коефіцієнта розподілу домішки  $k_p$  і швидкості її випаровування  $w_p$ .

*Побудова математичної моделі розподілу фосфору при вирощуванні монокристала кремнію за методом Чохральського.* Для побудови математичної моделі розподілу фосфору складаємо рівняння матеріального балансу фосфору в процесі вирощування монокристала кремнію:

$$n_p(0) = n_p(g) + n_{me}(g) + n_{\text{вин}}(g), \quad (2)$$

де  $n_p(0)$  і  $n_p(g)$  – кількість атомів фосфору в рідкій фазі перед початком кристалізації й після затвердіння частки розплаву  $g$  відповідно;  $n_{me}(g)$  – кількість атомів фосфору, що надійшли в монокристал;  $n_{\text{вин}}(g)$  – кількість атомів фосфору, що випарувалися з поверхні розплаву.

Виразивши масу монокристала як  $m_{\text{тв}} = m_0 \cdot g$  і масу розплаву як  $m_p(g) = m_0(1 - g)$  та враховуючи зв'язок між концентрацією домішки в рідкій і твердій фазах (1), знайдемо:

$$n_p(0) = \frac{m_0}{\gamma_{me}} \cdot \frac{N_{meP}(0)}{k_p(0)}; \quad n_p(g) = \frac{m_0}{\gamma_{me}} \cdot \frac{N_{meP}(g)}{k_p(g)} \cdot (1 - g), \quad (3)$$

де  $m_0$  – маса вихідного розплаву, г;  $N_{meP}(0)$  і  $N_{meP}(g)$  – густина атомів фосфору на початку росту монокристала і в момент затвердіння частки розплаву  $g$ , відповідно, ат/м<sup>3</sup>.

Використовуючи класичне припущення про відсутність вирівнювання концентрації домішки в твердій фазі, сумарну кількість атомів домішки, що надійшла в монокристал, визначаємо інтегруванням функції  $N_{me}(g)$ :

$$n_{me}(g) = \int_0^g N_{meP}(g) dV = \frac{m_0}{\gamma_{me}} \int_0^g N_{meP}(g) dg. \quad (4)$$

Кількість атомів фосфору, що випарувалися з поверхні розплаву за час, за який кристалізується частка розплаву  $g$ :

$$n_{\text{вин}}(g) = \frac{m_0}{\gamma_{me} \cdot v_g(g)} \int_0^g v_p(g) \left( \frac{R^2}{r^2} - 1 \right) dg, \quad (5)$$

де  $v_g(g)$  – швидкість витягування (росту) монокристала з розплаву, м/с;  $v_p(g)$  – швидкість випаровування фосфору, ат/м<sup>2</sup>·с;  $R$  – радіус циліндричної частини тигля, м;  $r$  – радіус циліндричної частини монокристала, м.

Після підстановки (3), (4) і (5) до рівняння балансу (2) і алгебраїчних перетворень одержуємо математичну модель розподілу фосфору в процесі вирощування монокристала кремнію за методом Чохральського:

$$\frac{N_{meP}(0)}{k_p(0)} - \frac{N_{meP}(g)}{k_p(g)} (1 - g) - \frac{(R^2 - r^2)}{r^2 v_g(g)} \int_0^g w_p(g) dg = \int_0^g N_{meP}(g) dg, \quad (6)$$

Перевагою даної моделі є відсутність при її побудові припущень про сталість протягом усього процесу вирощування монокристала величин ефективного коефіцієнта розподілу  $k_p$ , швидкості випаровування фосфору з поверхні розплаву  $v_p(g)$  та швидкості витягування монокристала  $v_g(g)$ .

*Алгоритм розв'язку моделі.* Значення радіусів тигля  $R$  і монокристала  $r$ , а також швидкості його витягування  $v_g(g)$  відомі з умов експерименту. Концентрація фосфору на різних ділянках монокристала  $N_{meP}$  вимірюється. Таким чином, (6) – рівняння із двома невідомими –  $k_p$ , і  $v_p(g)$ . Підставивши в (6) експериментальні значення  $N_{meP}$  і  $v_g$  для двох близьких значень  $g$ , одержимо систему із двох рівнянь, вирішивши яку, знайдемо значення цих невідомих. Труднощі полягають у тому, що до розв'язку не відомі функціональні залежності  $k_p(g)$ ,  $v_p(g)$ . Однак з аналізу технологічних умов процесу вирощування можна допустити, що принаймні для близьких значень  $g_1$ ,  $g_2$  ці величини можна вважати постійними з досить малою похибкою. При використанні такого припущення розв'язок такої системи рівнянь значно спрощується. Рівняння (6) має вигляд:

$$\frac{A}{k_p} + B_i v_p = C_i, \quad (7)$$

де  $i = 1, 2, 3 \dots$ ;

$$A_i = N_{\text{meP}}(g_i)(1 - g_i); \quad (8)$$

$$B_i = \frac{R^2 - r^2}{r^2 \nu_g} g_i; \quad (9)$$

$$C_i = \int_0^{g_i} N_{\text{me}} dg - \frac{N_{\text{meP}}(0)}{k_p(0)}. \quad (10)$$

Розв'язок моделі знаходимо з системи рівнянь (7) для двох близьких значень  $g_i$  та  $g_{i+1}$ :

$$k_p(g_i) = \frac{A_{i+1}B_i - A_iB_{i+1}}{C_{i+1}B_i - C_iB_{i+1}}; \quad (11)$$

$$w_p(g_i) = \frac{A_i(C_{i+1}B_i - C_iB_{i+1})}{B_i(A_{i+1}B_i - A_iB_{i+1})}, \quad i = 1, 2, 3 \dots \quad (12)$$

**Висновки.** Вперше побудовано математичну модель розподілу летучої домішки між рідкою, твердою й газовою фазами в процесі спрямованої кристалізації. Модель прив'язано до процесу розподілу легуючої домішки фосфору під час вирощування монокристала кремнію за методом Чохральського. Модель дозволяє за даними стандартного в промислових умовах контролю концентрації фосфору у вирощеному монокристалі кремнію оцінити величину фізичних параметрів, що є необхідними для оптимізації технологічного процесу: ефективного коефіцієнта розподілу домішки  $k_p$  і швидкості її випаровування  $w_p$ .

#### ЛІТЕРАТУРА:

1. *Балюба В.И., Грицик В.Ю., Давыдова Т.А., Калыгина В.М., Назаров С.С., Хлудкова Л.С.* Сенсоры аммиака на основе диодов Pd-n-Si // Физика и техника полупроводников. – Т. 39. – Вып. 2. – 2005. – С. – 285–288.
2. *Швец Е.Я.* Определение эффективного коэффициента распределения примеси при выращивании монокристалла // Теория и практика металлургии. – 2007. – № 4. – С. 31–35.
3. *Голев А.С., Головки О.П., Комаров А.Б., Червоний И.Ф.* Распределение углерода в процессе выращивания монокристаллов кремния по методу Чохральского // Металлургия: Збірник наукових праць ЗДІА. – Запоріжжя: ЗДІА, 2006. – Вип. 13. – С. 59–65.

ГОЛОВКО Юрій Вікторович – асистент Запорізької Державної інженерної академії.

Наукові інтереси:

– математичне і комп'ютерне моделювання.

Тел.: 8(0612)521469; 8(067)5844702.

E-mail: Derek-50@bk.ru

ШВЕЦЬ Євген Якович – професор, перший проректор Запорізької Державної інженерної академії.

Наукові інтереси:

– математичне і комп'ютерне моделювання.

Тел.: 8(0612)369034.

E-mail: shej@zgia.zp.ua

Подано

24.10.2008

**Головко Ю.В., Швець Є.Я.** Математичне моделювання розподілу летючої домішки в процесі вирощування монокристалів кремнію.

**Головко Ю.В., Швець Є.Я.** Математическое моделирование распределения летящей примеси в процессе выращивания монокристаллов кремния.

**Holovko U.V., Shvec E.Y.** Mathematical modeling of the distribution of flying impurities in the process of growing single crystal silicon.

УДК 621. 315. 592

**Математическое моделирование распределения летящей примеси в процессе выращивания монокристаллов кремния / Ю.В. Головко, Е.Я. Швець**

Разработано математическую модель распределения летящей примеси фосфора в процес се вирощування монокристаллов кремнія за методом Чохральського, которая учитывает изменение технологических параметров на протяжении процесса выращивания, которые влияют на это распределение. Модель решето относительно эффективного коэффициента распределения и скорости испарения атомов фосфора с поверхности расплавленного кремния.

УДК 621. 315. 592

**Mathematical modeling of the distribution of flying impurities in the process of growing single crystal silicon / U.V. Holovko, E.Y. Shvec**

A mathematical model of flying phosphorus impurities in the process of growing silicon for monokristal fishing method Chohralskogo, which takes into account the changing technological parameters for the process of raising, that affect this allocation. Model sieve for effective koefitsienta distribution and evaporation of phosphorus atoms from the surface of molten silicon.