

# Кинетика образования вакансионных микропор и междоузельных дислокационных петель в бездислокационных монокристаллах кремния

© В.И. Таланин, И.Е. Таланин

Классический приватный университет,  
Запорожье, Украина  
E-mail: v.i.talanin@mail.ru

(Поступила в Редакцию 25 декабря 2009 г.  
В окончательной редакции 27 февраля 2010 г.)

Проведен расчет образования вакансионных микропор и А-микродефектов в соответствии с моделью динамики точечных дефектов при условии отсутствия рекомбинации собственных точечных дефектов при высоких температурах. Предполагается, что такое решение возможно в случае начала процесса преципитации примеси вблизи фронта кристаллизации. Показано, что процесс образования вакансионных микропор носит гомогенный характер, а образование междоузельных дислокационных петель определяется в основном деформационным механизмом.

## 1. Введение

Как известно, при выращивании бездислокационных монокристаллов кремния в процессе их охлаждения во время роста образуются ростовые микродефекты. В соответствии с экспериментальной классификацией ростовых микродефектов различают: А-микродефекты, В-микродефекты,  $D(C)$ -микродефекты,  $(I + V)$ -микродефекты и вакансионные микропоры [1]. Такая классификация является очень удобной и оправданной с технологической точки зрения, так как возникновение того или иного вида ростовых микродефектов связано с определенными тепловыми условиями роста [2–4].

В настоящее время для описания процессов дефектообразования в полупроводниковом кристалле вообще и в кремнии в частности используют модель динамики точечных дефектов, при этом рассматривая кристалл как динамическую систему и задавая реальные граничные условия [5–8]. Математическая модель динамики точечных дефектов в кремнии количественно объясняет гомогенный характер образования вакансионных микропор и междоузельных дислокационных петель и является основой для понимания связи между дефектной структурой кристалла и процессами, происходящими в расплаве [8]. Расчет концентраций дефектов производится из предположения о быстрой рекомбинации вакансий и собственных междоузельных атомов кремния в сравнительно узкой области вблизи фронта кристаллизации. Это обстоятельство приводит к тому, что первичные дефекты находятся в равновесных концентрациях [3]. Исходя из потока дефектов в глубь кристалла можно получить концентрацию оставшихся первичных дефектов после прохождения узкой рекомбинационной области. При дальнейшем охлаждении кристалла в процессе вытягивания первичные дефекты собираются в скопления: вакансионные микропоры в области преобладания вакансий и междоузельные дислокационные петли в области преобладания собственных междоузельных атомов кремния.

Следует отметить, что в общем случае модель динамики точечных дефектов состоит из трех приближений: строгого, упрощенного и дискретно-континуального [9]. Строгая модель требует решения интегрально-дифференциальных уравнений для полей концентраций точечных дефектов, и в ней распределение ростовых микродефектов является функцией координат, времени и времени эволюции распределения размера микродефекта [10–12]. Большие затраты времени и средств на проведение расчетов потребовали разработки упрощенной модели, в которой вводится аппроксимация среднего радиуса дефекта квадратным корнем из средней площади дефекта [9]. Эта аппроксимация учитывается в добавочной переменной, которая пропорциональна общей площади поверхности дефекта. Упрощенная модель эффективна при расчетах двумерного распределения ростовых микродефектов [4,9]. Обе модели используют классическую теорию зарождения, предполагая расчет образования стабильных зародышей и кинетики диффузионно-ограниченного роста дефектов. Дискретно-континуальное приближение предполагает комплексный подход: решение дискретных уравнений для мельчайших дефектов и решение уравнений Фоккера–Планка для дефектов большего размера [5,13,14].

В то же время модель динамики точечных дефектов не применялась для расчета процессов образования междоузельных дислокационных петель и вакансионных микропор в предположении, что процесс рекомбинации собственных точечных дефектов отсутствует вблизи фронта кристаллизации. А именно на этот факт указывают экспериментальные и теоретические исследования [2,15,16].

Цель настоящей работы — рассчитать процесс образования вакансионных микропор и междоузельных дислокационных петель в рамках модели динамики точечных дефектов при условии отсутствия рекомбинации

собственных точечных дефектов при высоких температурах.

## 2. Математическая модель

В общем случае модель, описывающая динамику дефектов в кристалле, включает кинетику френкелевских реакций, зарождение точечных дефектов, рост кластеров, баланс точечных дефектов [8]. В кинетике френкелевских реакций рассматриваются взаимная аннигиляция и образование пар точечных дефектов во всем объеме кристалла. В разделе зарождения точечных дефектов рассматривается серия бимолекулярных реакций. В разделе роста кластеров рассматривается движение комплексов точечных дефектов в направлении от границы раздела расплав–кристалл.

Баланс точечных дефектов включает в себя их диффузию и конвекцию, френкелевские реакции и их расход на образование кластеров. Основные уравнения баланса точечных дефектов записываются следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_i}{\partial t} = & \frac{\partial(D_i \frac{\partial C_i}{\partial z})}{\partial z} - V \frac{\partial C_i}{\partial z} - k_{IV}(C_i C_v - C_{i,e} C_{v,e}) \\ & - 4\pi D_i (C_i - C_{i,e}) \int_0^t R_{cl,i}(z, \tau, t) J_{cl,i}(\xi, \tau) d\tau \\ & - J_{cl,i}(z, t) m_i^*, \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_v}{\partial t} = & \frac{\partial(D_{vi} \frac{\partial C_{vi}}{\partial z})}{\partial z} - V \frac{\partial C_{vi}}{\partial z} - k_{IV}(C_i C_v - C_{i,e} C_{v,e}) \\ & - 4\pi D_v (C_{vi} - C_{v,e}) \int_0^t R_{cl,v}(z, \tau, t) J_{cl,v}(\xi, \tau) d\tau \\ & - J_{cl,v}(z, t) m_v^*. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $C_{i,v}$  — концентрация вакансий ( $v$ ) и собственных междоузельных атомов кремния ( $i$ ) в выращиваемом кристалле,  $C_{ie,ve}$ ,  $D_{i,v}$  — их равновесные концентрации и коэффициенты диффузии,  $J_{cl,j}$  — концентрация критических кластеров,  $m^*$  — количество мономеров,  $R_{cl}$  — радиус критического кластера,  $z$  — расстояние от фронта кристаллизации,  $J(\xi, \tau)$  — скорость формирования кластеров,  $k_{IV}$  — рекомбинационный фактор,  $\tau$  — время образования кластера,  $\xi = z - \int_0^t V d\tau'$  — расстояние от фронта кристаллизации до области образования кластера,  $\tau'$  — время между  $t$  и  $\tau$ .

При моделировании процесса образования междоузельных дислокационных петель и вакансионных микропор авторы модели динамики точечных дефектов рассматривают процесс их зарождения и образования в узкой температурной области  $\xi = z - \int_0^t V d\tau'$  при  $T < T_m = 300$  К, где  $T_m$  — температура плавления [8].

В уравнениях (1) и (2) первый член отвечает за изменения концентрации точечных дефектов за счет их диффузии, второй член — их конвекции, третий член — френкелевских реакций, четвертый член — их расходования на существующие кластеры, пятый член — за счет образования новых кластеров. Скорость расхода точечных дефектов на образование новых кластеров ничтожна и может быть игнорирована в дальнейшем [8].

Диффузионно-ограниченные скорости роста кластеров при любых  $z$  и  $t$ , формирующихся при соответствующих  $\xi$  и  $\tau$ , описываются следующими уравнениями:

$$\frac{\partial R_{cl,i}^2(z, \tau, t)}{\partial t} = \frac{2D_i}{\psi_{i,cl}} (C_i - C_{i,e}) - V \frac{\partial R_{cl,i}^2(z, \tau, t)}{\partial z}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial R_{cl,v}^2(z, \tau, t)}{\partial t} = \frac{2D_v}{\psi_{v,cl}} (C_v - C_{v,e}) - V \frac{\partial R_{cl,v}^2(z, \tau, t)}{\partial z}, \quad (4)$$

где  $\psi$  — плотность мономеров в кластере.

Уравнения скорости зарождения описываются следующим образом:

$$\begin{aligned} J_{cl,i}(z, t) = & [4\pi R_{cl,i}(m_i^*) D_i C_i] \\ & \times \left( k_b T \ln \frac{C_i}{C_{i,e}} (12\pi F_i^* k_b T)^{1/2} \right) [\rho_{site} e^{(-F_{iv}^*/k_b T)}], \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} J_{cl,v}(z, t) = & [4\pi R_{cl,v}(m_v^*) D_v C_v] \\ & \times \left( k_b T \ln \frac{C_{vi}}{C_{v,e}} (12\pi F_v^* k_b T)^{1/2} \right) [\rho_{site} e^{(-F_v^*/k_b T)}], \end{aligned} \quad (6)$$

где  $F^*$  — максимальное изменение свободной энергии,  $\rho_{site}$  — концентрация мест для зародышеобразования (в формуле (5)).

Исходная длина (или высота) кристалла принимается за 0. Для кристалла конечной длины  $h$  равновесные условия принимаются превалирующими по всей поверхности, включая границу раздела кристалл–расплав.

$$h(t=0) = 0, \quad (7)$$

$$C_i(z=0, t) = C_{i,e}, \quad (8)$$

$$C_v(z=0, t) = C_{v,e}, \quad (9)$$

$$C_i(z=h, t) = C_{i,e}, \quad (10)$$

$$C_v(z=h, t) = C_{v,e}. \quad (11)$$

Исходный размер установившегося критического кластера ничтожен по сравнению с размером микродефекта. Следовательно, исходный размер стабильного кластера оказывает незначительное влияние на его финальный размер. Исходный размер стабильного кластера (зародыша) рассчитывается исходя из количества мономеров в критическом кластере

$$R_{cl,i}(\xi, \tau) = \left( \frac{3}{4\pi} \frac{m_i^*}{\psi_{i,cl}} \right)^{1/3}, \quad (12)$$

$$R_{cl,v}(\xi, \tau) = \left( \frac{3}{4\pi} \frac{m_v^*}{\psi_{v,cl}} \right). \quad (13)$$

Уравнения (1)–(13) вместе с энергетическим балансом горячей зоны управляют и определяют количественную динамику точечных дефектов. В полупроводниковой промышленности качество кристалла часто определяется на основе общей концентрации или общей плотности и представляется средним размером существующих кластеров. Общая плотность кластеров подсчитывается суммированием кластеров различных размеров в текущем состоянии

$$N_{cl,i} = \int_0^t J_{cl,i}(\xi, \tau) d\tau, \quad (14)$$

$$N_{cl,v} = \int_0^t J_{cl,v}(\xi, \tau) d\tau. \quad (15)$$

Средний радиус кластера определяется следующим образом:

$$R_{cl,i,avg} = \left( \frac{\int_0^t R_{cl,i}^3(z, \tau, t) J_{cl,i}(\xi, \tau) d\tau}{\int_0^t J_{cl,i}(\xi, \tau) d\tau} \right)^{1/3}, \quad (16)$$

$$R_{cl,v,avg} = \left( \frac{\int_0^t R_{cl,v}^3(z, \tau, t) J_{cl,v}(\xi, \tau) d\tau}{\int_0^t J_{cl,v}(\xi, \tau) d\tau} \right)^{1/3}, \quad (17)$$

где знак avg обозначает средний объем.

Рассмотренная модель динамики точечных дефектов — одномерная по природе, и, следовательно, влияние радиальной диффузии, преобладающее вблизи поверхности кристалла, здесь не учитывается. Поэтому модель может применяться к осевому распределению дефектов в кристалле при фиксированных радиальных положениях вдали от поверхности.

Расчет энергетического баланса можно выполнять, используя квазистационарные аппроксимации [8]. Временно-зависимые изменения температурного профиля в растущем кристалле получают, рассчитывая температурные профили при различных длинах кристалла на разных стадиях роста. Основные исходные допущения для расчетов следующие: 1) система осесимметрична; 2) расплав может быть аппроксимирован как твердое тело; 3) два твердых тела находятся в совершенном контакте; 4) энергетический переход с открытого конца происходит посредством излучения и конвекции; 5) баланс энергии на границе раздела кристалл–расплав является ключевым для определения формы границы раздела; 6) конвекция между двумя фазами представляется хорошо согласуемой с коэффициентами теплопереноса; 7) условия постоянства температуры точно определяют границу расчетной области.

### 3. Результаты и их обсуждение

3.1 Кинетика процесса образования вакансионных микропор. Экспериментально определенный температурный диапазон образования вакансионных микропор в кристаллах большого диаметра составляет 1403–1343 К [17–19], поэтому приближенные вычисления для решения в рамках модели динамики точечных дефектов проводились для диапазона 1403–1073 К. При расчетах использовались следующие данные:

$$\lambda_v = 650 \text{ erg/cm}^2, \quad k = 8.6153 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K},$$

$$D_v = 188.449 \exp(-1.917/kT),$$

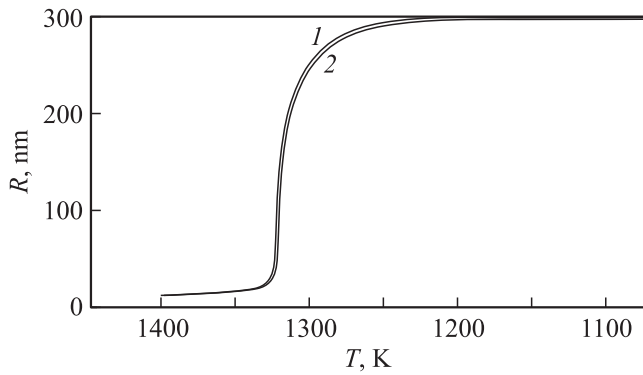
$$C_{ve} = 1.11639 \cdot 10^{27} \exp(-3.9/kT), \quad \rho = 5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}.$$

Расчетная модель использует классическую теорию зарождения и формирования стабильных кластеров, являясь, строго говоря, распределением размера кластеров (вакансионных микропор) на основании временного процесса их образования и предшествующей истории.

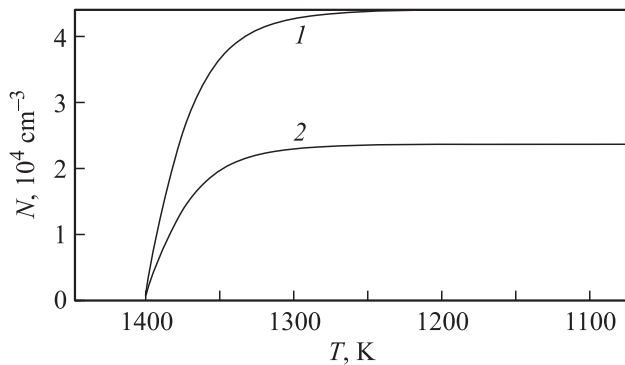
Система уравнений решается с использованием точной пространственной и временной дискретизации. Алгоритм включает решение уравнения  $V = \frac{dh}{dt}$  для скорости роста кристалла с одновременным решением уравнений (1)–(4) и граничными и начальными условиями (7)–(11). Распределение размеров определяется из решения уравнений (3)–(4) для соответствующего типа ростовых микродефектов (вакансионных микропор или А-микродефектов). В соответствии с целью настоящей работы в расчетах полагалось, что фактор рекомбинации  $k_{IV} = 0$  [2].

Предполагается, что в области высоких температур ( $1682 < T < 1403$  К, параметр роста  $V/G > \xi_{crit}$ , где  $G$  — градиент температуры на фронте кристаллизации) происходит зарождение и рост преципитатов примеси [2]. В этой области пересыщение собственных точечных дефектов (вакансий) низкое, поэтому скорость зарождения вакансионных микропор пренебрежимо мала. При  $T \leq 1403$  К пересыщение растет, что приводит к росту скорости зарождения вакансионных микропор. После образования вакансионных микропор в процессе их роста происходит быстрое расхождение вакансий. В результате пересыщение уменьшается и скорость зарождения вакансионных микропор резко падает. Зарождение преобладает в узком температурном интервале, и поэтому вне зоны образования вакансионных микропор их зарождение игнорируется. Кроме того, так как скорость роста вакансионных микропор из-за увеличения их размера и соответствующего уменьшения концентрации вакансий резко падает, рост вакансионных микропор вне зоны зарождения также не учитывается.

На рис. 1 приведены результаты расчета температурной зависимости критического радиуса вакансионных микропор, а на рис. 2 — температурная зависимость концентрации вакансионных микропор.



**Рис. 1.** Зависимость критического радиуса вакансионных микропор от температуры охлаждения кристалла во время роста. Скорость роста  $V$ , mm/min: 1 — 0.6, 2 — 0.7.



**Рис. 2.** Зависимость концентрации вакансионных микропор от температуры охлаждения кристалла во время роста. Обозначение кривых то же, что на рис. 1.

Исходя из анализа значений современных температурных полей при росте кристаллов с помощью метода Чохральского принято фиксированное значение  $G = 2.5$  K/mm [8]. Моделирование проводилось для кристаллов диаметром 150 mm, которые выращивались при скоростях роста  $V = 0.6$  и  $0.7$  mm/min. Эти условия выращивания соответствуют параметру роста  $V/G > \xi_{\text{crit}}$ .

Температура образования вакансионных микропор определяется как температура при наивысшей скорости зарождения, она соответствует  $\sim 1333$  K ( $\sim 1060^\circ\text{C}$ ) (рис. 1). Увеличение скорости роста кристалла незначительно уменьшает критический радиус пор и незначительно влияет на температуру зарождения. Как известно, предотвратить образование вакансионных микропор (т.е. добиться выполнения условия  $R_v \rightarrow 0$ ) можно, увеличив скорость охлаждения свыше значения  $40$  K/min [7]. Такие условия выполняются при выращивании малогабаритных кристаллов кремния. При реальных скоростях роста крупногабаритных монокристаллов (диаметром более 80 mm) подавление образования вакансионных микропор невозможно [20].

Однако незначительное увеличение скорости роста кристалла почти в 2 раза уменьшает концентрацию

вводимых дефектов (рис. 2). Интересен факт появления „полочки“ (слабого увеличения критического радиуса в температурном диапазоне  $\sim 1403$ – $1360$  K), которая свидетельствует о том, что процессы образования преципитатов и вакансионных микропор вблизи  $T \sim 1403$  K проходят в некотором температурном интервале хоть и с разными, но с сопоставимыми скоростями зарождения (рис. 1). В этом температурном интервале уменьшается потребление растущими преципитатами кислорода вакансий, и за счет роста пересыщения вакансий образуются поры с относительно малым критическим радиусом. Местами их зарождения могут служить преципитаты, которые образовались ранее. Эти данные подтверждаются экспериментальными исследованиями с помощью просвечивающей электронной микроскопии термообработанных монокристаллов кремния. Кратковременные (от 15 до 30 min) термообработки при температуре  $T = 1373$  K приводят к резкому сокращению размеров вакансионных микропор и выявлению на их месте крупных преципитатов [17]. Такое развитие событий возможно только в том случае, если преципитаты определенных размеров уже существуют в данном месте и материалы для их роста (вакансии и атомы примеси) находятся рядом. В то же время в этом температурном интервале концентрация вакансионных микропор резко возрастает (рис. 2). Наличие „полочки“ чрезвычайно важно с точки зрения согласования и непрерывности процессов дефектообразования при охлаждении кристалла во время выращивания. Можно предположить, что во всей области образования и роста вакансионных микропор процесс роста преципитатов проходит с небольшой скоростью из-за уменьшения концентрации свободных атомов примеси.

Дальнейшее снижение температуры способствует росту пересыщения вакансий, что приводит к резкому росту скорости зарождения вблизи  $\sim 1333$  K. Область зарождения мала, в ней растут и формируются поры. За областью зарождения идет область роста пор. В этой области вакансионные микропоры поглощают вакансии и их скорость роста замедляется. Следует отметить, что в этих областях наблюдается слабый рост с последующим формированием определенного значения концентрации вакансионных микропор (рис. 2). В этих областях примеси осаждаются на стенках вакансионных микропор. Этот факт подтвержден многочисленными экспериментальными исследованиями с помощью Оже-спектроскопии, которые выявили наличие на стенках вакансионных микропор атомных пленок кислорода и углерода [17,19,21].

В общем случае критический размер вакансионных микропор слабо растет на ранних стадиях зарождения, затем быстро увеличивается при большой скорости зарождения и достигает асимптотических значений (рис. 1).

Расчеты проводились в рамках модели динамики точечных дефектов, т.е. для тех же кристаллов и с теми же параметрами, что и в уже классической работе

по моделированию вакансионных микропор и междоузельных дислокационных петель (А-микродефектов) [8]. Полученные результаты несколько отличаются от данных работы [8]. Эти различия заключаются в том, что: 1) скорость зарождения вакансионных микропор на начальной стадии зоны их образования имеет малую величину и слабо растет с уменьшением температуры; 2) резкий рост скорости зарождения, который определяет температуру зарождения, происходит при  $T \sim 1333$  К.

Эти различия появляются в результате того, что в наших расчетах фактор рекомбинации  $k_{IV} = 0$ . Если принять  $k_{IV} \neq 0$ , то в области высоких температур становится невозможным рассмотрение взаимодействия примеси с собственными точечными дефектами, что признается авторами модели динамики точечных дефектов [3–14]. В этом случае в рамках модели возникает противоречие между расчетами математической модели и реальной физической системой, что проявляется в игнорировании процесса преципитации [8].

В работах [1,22] приведены результаты расчетов модели образования вакансионных микропор. Анализ экспериментальных и расчетных данных в рамках этой модели показывает, что образование вакансионных микропор в бездислокационных монокристаллах кремния обусловлено [22]: 1) резким уменьшением концентрации кислорода, который не связан в примесные агломераты; 2) большим диаметром кристалла (более 75 мм), что приводит к отсутствию стока вакансий из центральной части кристалла на его боковую поверхность; 3) наличием, как правило, в кристаллах большого диаметра кольца D-микродефектов, которое образуется в результате выхода грани (111) на фронт кристаллизации и приводит к обеднению примесными атомами области внутри этого кольца.

3.2. Моделирование процесса образования А-микродефектов (междоузельных дислокационных петель). Вычислительный эксперимент проводился аналогично расчету образования вакансионных микропор с использованием следующих расчетных данных:

$$\lambda_i = 1326 \text{ erg/cm}^2, \quad k = 8.6153 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K},$$

$$D_i = 776.8 \exp(-2.0/kT),$$

$$C_{ie} = 2.52095 \cdot 10^{26} \exp(-3.7/kT), \quad \rho = 5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}.$$

С учетом экспериментальных данных относительно области образования А-микродефектов искомая температурная область расчета располагалась в интервале от 1223 до 1023 К [8]. Предполагается, что в области высоких температур ( $1682 < T < 1223$  К, параметр роста  $V/G < \xi_{crit}$ ) происходит зарождение и рост преципитатов примеси. В этой области пересыщение собственных точечных дефектов (собственных междоузельных атомов кремния) низкое, поэтому скорость зарождения А-микродефектов пренебрежимо мала. При  $T \leq 1223$  К пересыщение растет, что приводит к росту

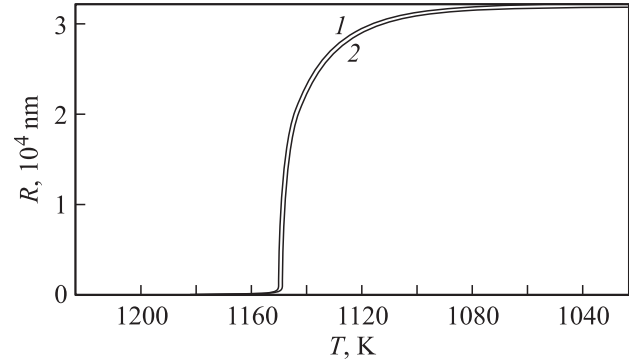


Рис. 3. Зависимость критического радиуса А-микродефектов от температуры охлаждения кристалла во время роста. Скорость роста  $V$ , mm/min: 1 — 0.1, 2 — 0.25.

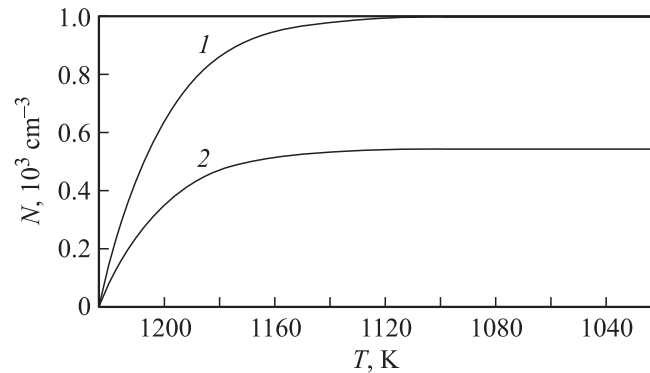


Рис. 4. Зависимость концентрации А-микродефектов от температуры охлаждения кристалла во время роста. Обозначение кривых то же, что на рис. 3.

скорости зарождения А-микродефектов. После образования А-микродефектов в процессе их роста происходит быстрое расходование собственных междоузельных атомов кремния. В результате пересыщение уменьшается, и скорость зарождения А-микродефектов резко падает. Следовательно, зародышеобразование преобладает в узком температурном интервале, и поэтому вне зоны образования А-микродефектов их зарождение игнорируется. Кроме того, так как скорость роста А-микродефектов из-за увеличения их размера и соответствующего уменьшения концентрации собственных междоузельных атомов кремния резко падает, рост А-микродефектов вне зоны зарождения также не учитывается.

На рис. 3 приведены результаты расчета температурной зависимости критического радиуса А-микродефектов, а на рис. 4 — температурная зависимость концентрации А-микродефектов.

Моделирование проводилось для кристаллов диаметром 150 мм, которые выращивались при скоростях роста  $V = 0.1$  и  $0.25$  mm/min и  $G = 2.5$  К/мм [8]. Эти условия выращивания соответствуют параметру роста  $V/G < \xi_{crit}$ .

Температура образования А-микродефектов соответствует  $\sim 1153$  К ( $\sim 880^\circ\text{C}$ ) (рис. 3). Увеличение скорости роста кристалла слабо уменьшает критический радиус А-микродефектов и слабо влияет на температуру зарождения. Из рис. 4 видно, что увеличение скорости роста кристалла почти в 2 раза уменьшает концентрацию вводимых дефектов.

Значительный интерес представляют результаты вычислительного эксперимента на начальной стадии зарождения А-микродефектов в области так называемой „полочки“ (рис. 3). В отличие от рис. 1 в этой области для А-микродефектов увеличение критического радиуса в температурном диапазоне  $\sim 1223$ – $1160$  К ничтожно мало. В этом температурном интервале уменьшается потребление растущими преципитатами углерода собственных междоузельных атомов кремния и за счет роста их пересыщения образуются А-микродефекты с очень малым критическим радиусом.

Дальнейшее снижение температуры способствует росту пересыщения собственных междоузельных атомов кремния, что приводит к резкому росту скорости зарождения вблизи  $\sim 1153$  К. Область зарождения мала, в ней растут и формируются А-микродефекты. За областью зарождения идет область роста А-микродефектов. В этой области А-микродефекты поглощают собственные междоузельные атомы кремния, и их скорость роста замедляется. В этих областях наблюдается слабый рост с последующим формированием определенного значения концентрации А-микродефектов (рис. 3).

Данные вычислительного эксперимента по определению концентрации вакансионных микропор хорошо коррелируют с экспериментально наблюдаемыми результатами ( $10^4$ – $10^5$  см $^{-3}$ ) [17]. Для А-микродефектов, где эксперименты дают значение  $\sim 10^6$ – $10^7$  см $^{-3}$  [1], расхождение достигает трех порядков. Это может быть связано с тем, что в отличие от вакансионных микропор, которые образуются только за счет действия коагуляционного механизма, образование А-микродефектов происходит за счет действия как коагуляционного механизма, так и механизма призматического выдавливания (деформационный механизм) [2]. Результаты расчетов свидетельствуют о том, что основной вклад в образование А-микродефектов вносит механизм призматического выдавливания, когда образование междоузельных дислокационных петель связано со снятием напряжений вокруг растущего преципитата. Следовательно, процессы преципитации примесей, которые происходят при охлаждении кристалла от температуры кристаллизации, носят фундаментальный (первичный) характер и определяют весь процесс дефектообразования при выращивании бездислокационных монокристаллов кремния.

#### 4. Заключение

В настоящей работе предполагалось, что зарождение вакансионных микропор и междоузельных дислокацион-

ных петель начинается при определенных температурах, когда появляются условия для возникновения пересыщения по собственным точечным дефектам (вакансиям или собственным междоузельным атомам кремния), в то время как преципитаты уже сформированы и между ними проходят конкурирующие процессы роста одних и растворения других. Это предположение базировалось на экспериментальных фактах отсутствия рекомбинации собственных точечных дефектов в области высоких температур при охлаждении кристалла от температуры плавления [2]. Подтверждение этих экспериментальных результатов теоретическими расчетами [15] позволяет процессы анализа и расчета дефектной структуры бездислокационных монокристаллов кремния условно рассматривать в трех областях: 1) высокотемпературной области ( $\sim 1682$ – $1373$  К), когда происходит зарождение и рост преципитатов примесей; 2) среднетемпературной области ( $\sim 1373$ – $1070$  К), когда в зависимости от параметра роста  $V/G$  происходит зарождение и рост вакансионных микропор или междоузельных дислокационных петель; 3) низкотемпературной области (ниже  $1070$  К), когда идут процессы укрупнения существующих преципитатов.

Проделанный в настоящей работе расчет образования вакансионных микропор и междоузельных дислокационных петель (А-микродефектов) показал, что сделанные допущения существенным образом не отличаются от результатов предыдущих расчетов в рамках модели динамики точечных дефектов. Это обстоятельство свидетельствует о том, что математическую модель динамики точечных дефектов можно адекватно использовать, опираясь на физическую модель, в которой процесс преципитации примеси проходит до момента образования вакансионных микропор или междоузельных дислокационных петель. Кроме того, существенным итогом расчетов является подтверждение коагуляционного процесса образования вакансионных микропор и деформационного процесса образования междоузельных дислокационных петель.

#### Список литературы

- [1] В.И. Таланин. Моделирование и свойства дефектной структуры бездислокационных монокристаллов кремния. ГУ „ЗИГМУ“, Запорожье (2007). 275 с.
- [2] V.I. Talanin, I.E. Talanin. In: New research on semiconductors / Ed. T.B. Elliot. Nova Sci. Publ., Inc., N.Y. (2006). P. 31.
- [3] V.V. Voronkov. J. Cryst. Growth **59**, 625 (1982).
- [4] M.S. Kulkarni. J. Cryst. Growth **303**, 438 (2007).
- [5] T. Sinno, R.A. Brown. J. Electrochem. Soc. **146**, 2300 (1999).
- [6] E. Dornberger, W. von Ammon, J. Virbulis, B. Hanna, T. Sinno. J. Cryst. Growth **230**, 291 (2001).
- [7] K. Nakamura, T. Saishoji, J. Tomioka. J. Cryst. Growth **237**–**239**, 1678 (2002).
- [8] M.S. Kulkarni, V.V. Voronkov, R. Falster. J. Electrochem. Soc. **151**, G 663 (2004).
- [9] M.S. Kulkarni. Ind. Eng. Chem. Res. **44**, 6246 (2005).

- [10] V.V. Voronkov, R. Falster. *J. Appl. Phys.* **91**, 5802 (2002).
- [11] T. Sinno, R.A. Brown, W. von Ammon, E. Dornberger. *J. Electrochem. Soc.* **145**, 302 (1998).
- [12] K. Nakamura, T. Saishoji, T. Kubota, T. Iida, Y. Shimanuki, T. Kotooka, J. Tomioka. *J. Cryst. Growth* **180**, 61 (1997).
- [13] Z. Wang, R.A. Brown. *J. Cryst. Growth* **231**, 442 (2001).
- [14] R.A. Brown, Z. Wang, T. Mori. *J. Cryst. Growth* **225**, 97 (2001).
- [15] В.И. Таланин, И.Е. Таланин. *ФТТ* **49**, 450 (2007).
- [16] V.I. Talanin, I.E. Talanin, A.A. Voronin. *Can. J. Phys.* **85**, 1459 (2007).
- [17] M. Itsumi. *J. Cryst. Growth* **237–239**, 1773 (2002).
- [18] Y. Yanase, H. Nishihata, T. Ochiai, H. Tsuya. *Jpn. J. Appl. Phys.* **37**, *I*, 1 (1998).
- [19] T. Ueki, M. Itsumi, T. Takeda, K. Yoshida, A. Takaoka, S. Nakajima. *Jpn. J. Appl. Phys.* **37**, L 771 (1998).
- [20] В.И. Таланин. *Изв. вузов. Материалы электрон. техники* **4**, 27 (2007).
- [21] T. Ueki, M. Itsumi, T. Takeda. *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**, 5695 (1999).
- [22] V.I. Talanin, I.E. Talanin, S.A. Koryagin, M.Yu. Semikina. *Semicond. Phys. Quantum Electron. Optoelectron.* **9**, 77 (2006).