

# ОБЩИЕ ВОПРОСЫ

УДК 621.315.592:548.4

## ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ АНАЛИЗА И РАСЧЕТА ОБРАЗОВАНИЯ РОСТОВЫХ МИКРОДЕФЕКТОВ В БЕЗДИСЛОКАЦИОННЫХ МОНОКРИСТАЛЛАХ КРЕМНИЯ

© 2010 г. В. И. Таланин, И. Е. Таланин, Н. Ф. Устименко  
*Классический приватный университет, Украина*

В качестве виртуального экспериментального прибора для анализа и расчета образования ростовых микродефектов в нелегированных бездислокационных монокристаллах кремния предложен программный комплекс. С помощью программного комплекса, используя параметры роста (скорость роста кристалла, диаметр кристалла, температурные градиенты, скорость охлаждения), можно рассчитать характеристики процесса преципитации кислорода и углерода во время охлаждения кристалла после выращивания от температуры кристаллизации до комнатной температуры. Программный комплекс позволяет проводить анализ и расчет образования вакансионных микропор и межзельных дислокационных петель.

**Ключевые слова:** кремний, ростовые микродефекты, скорость роста кристалла, осевой температурный градиент, диффузионная модель, преципитат, вакансионная микропора, межзельная дислокационная петля.

### Введение

Проблема дефектообразования в бездислокационных монокристаллах кремния в процессе их роста является основополагающей (фундаментальной) проблемой физики полупроводников и поэтому служит ключом к решению других сложных проблем физики, материаловедения и технического применения монокристаллов кремния. Это связано с тем, что структурные дефекты, наряду с примесями, в очень сильной степени влияют на важнейшие электрические, оптические и фотоэлектрические свойства кристаллов кремния.

Во время выращивания бездислокационных монокристаллов кремния методами Чохральского и бестигельной зонной плавки имеет место образование структурных несовершенств, получивших название «ростовые микродефекты». Ростовые микродефекты представляют промежуточный класс между точечными и линейными дефектами и являются агрегатами собственных точечных дефектов и примесей.

В настоящее время в результате многочисленных исследований бездислокационных монокристаллов

кремния получены различные экспериментальные данные о закономерностях образования и взаимодействия точечных дефектов, накоплен огромный практический опыт по выращиванию совершенных монокристаллов [1, 2]. Однако экспериментальные исследования требуют больших материальных и временных затрат, а теоретические исследования проводятся для отдельных кристаллов с четко фиксированными параметрами их роста [3, 4].

В связи с этим возникает необходимость создания программного продукта, который позволит осуществить имитацию реального эксперимента, с максимальной точностью воспроизводящую реальные характеристики процесса выращивания монокристаллов кремния. В этом случае на основании виртуального вычислительного эксперимента можно было бы определять тепловые условия роста кристаллов, прогнозировать и управлять дефектной структурой кристалла. Такой программный продукт можно считать новым виртуальным экспериментальным прибором, а методику его применения — рассматривать в качестве новой техники эксперимента.

Цель работы — разработка программного комплекса для анализа и расчета образования ростовых микродефектов в бездислокационных монокристаллах кремния.

### Физическая и математические модели

Современные вычислительные методы и современные вычислительные машины позволяют выполнять детальные параметрические исследования сложных физических процессов [5]. Вычислительный эксперимент в наиболее общей форме складывается из следующих этапов:

- нахождение (выбор) физической модели исследуемого явления;
- выбор математической модели, в той или иной степени адекватной физической модели;
- выбор или разработка метода расчета, реализующего выбранную математическую модель;
- создание соответствующей программы расчета на электронно-вычислительной машине;
- проведение многовариантных расчетов и обработка их результатов;
- сравнение результатов расчета с данными физического эксперимента и другими теоретическими исследованиями.

Таким образом, общая концепция вычислительного эксперимента не отвергает физический эксперимент, а только дополняет его.

В общем случае любая моделируемая система, в том числе процесс дефектообразования в бездислокационных монокристаллах кремния, может рассматриваться в качестве классического «черного ящика», обладающего множеством внутренних параметров, в который поступает множество входных воздействий, на который действует множество факторов окружающей среды (внешних) и который выдает множество выходных параметров как свою реакцию на входные воздействия и внешние факторы. Если подходить к исследованию бездислокационных монокристаллов кремния с таких общих позиций, то можно говорить про многообразие, в известной степени, протекающих в них физических процессов. Поскольку наиболее важным в моделировании является адекватность модели, т. е. степень ее соответствия реальным процессам, то для успешного решения стоящей перед нами задачи требуется выделить центральный (фундаментальный) процесс, протекающий в рассматриваемой системе.

Для этого необходимо рассмотреть систему, находящуюся в тех же условиях, что и при проведении экспериментальных исследований. Следовательно, к минимуму должно быть сведено множество входных воздействий и внутренних параметров (легирующие примеси, дополнительные обработки в процессе роста и т. д.). Это позволит говорить о том, что в системе нелегированных бездислокационных монокристаллов кремния внешними факторами являются

тепловые условия выращивания (скорость роста кристалла, температурные градиенты, скорость охлаждения), а внутренними параметрами — собственные точечные дефекты (вакансии и собственные межузельные атомы), входными воздействиями — атомы фоновых примесей (кислорода и углерода), выходными параметрами — образующиеся ростовые микродефекты. Такая, в некоторой степени идеализированная система, в которой непосредственно взаимодействует минимальное число компонентов, позволит построить модель основных протекающих процессов. Любое последующее добавление в рассмотрение каких-либо дополнительных факторов (например, других примесных атомов, а не только фоновых) не изменит основной модели, но усложнит ее и приблизит к реальным условиям.

Выбор такой модели программного комплекса обусловлен следующими, экспериментально установленными данными [1, 6]:

- рекомбинацией собственных точечных дефектов при высоких температурах можно пренебречь [7];

- фоновые примеси углерода и кислорода участвуют в процессе дефектообразования в качестве центров зарождения [8];

- распад пересыщенного твердого раствора точечных дефектов при охлаждении кристаллов кремния от температуры кристаллизации осуществляется по двум независимым механизмам (ветвям): вакансионному и межузельному [1];

- основой процесса дефектообразования являются первичные агломераты, которые образуются во время охлаждения кристаллов кремния от температуры кристаллизации за счет взаимодействия точечных дефектов «примесь — собственный точечный дефект» (кислородно-вакансионные и углеродно-межузельные агломераты) [1];

- в процессе охлаждения кристалла при температуре ниже 1150 °С в зависимости от тепловых условий роста формируются вторичные ростовые микродефекты [1, 9];

- образование вторичных ростовых микродефектов обусловлено действием коагуляционного (вакансионные микропоры и межузельные дислокационные петли) [3, 10] и деформационного (межузельные дислокационные петли) механизмов [11];

- образование вторичных ростовых микродефектов управляется ростовым параметром  $V/G = C_{crit}$ , где  $V$  — скорость роста кристалла;  $G$  — осевой температурный градиент (при  $V/G > C_{crit}$  образуются вакансионные микропоры, а при  $V/G < C_{crit}$  — межузельные дислокационные петли) [12].

Для расчета первичных и вторичных ростовых микродефектов использовали два математических подхода: аналитические вычисления (решение дифференциальных уравнений диссоциативной диффузии) и приближенные вычисления (решение ищется в виде систем взаимосвязанных дискретных

дифференциальных уравнений квазихимических реакций для описания начальных стадий образования зародышей новых фаз и аналогичной системы континуальных дифференциальных уравнений типа Фоккера—Планка).

Математические модели образования ростовых микродефектов дали нам эквивалент объекта (процесс дефектообразования во время роста кристалла), который в математической форме отражает важнейшие его свойства — положения, которым он подчиняется, и связи, присущие составляющим его частям [4, 6, 11, 13]. Математические модели представлены в форме, удобной для применения численных методов, а вычислительный алгоритм не только определяет последовательность вычислительных и логических операций для нахождения искомых величин с заданной точностью, но и, как показали результаты расчетов, не искажает основных свойств модели и, следовательно, исходного объекта. Электронным эквивалентом объекта для непосредственного испытания на компьютере являлись программы, которые переводили математические модели и алгоритмы на доступный компьютеру язык (C++).

### Структура программы для анализа процесса дефектообразования

Программа написана на языке высокого уровня программирования C++ в компиляторе Borland C++ Builder. Программный комплекс состоит из двух последовательных частей: блока определения вида дефектной структуры и расчетно-графического блока.

Определение вида дефектной структуры базируется на стандартных картинах распределения ростовых микродефектов, выявляемых с помощью селективного травления [1], для различных скоростей роста кристалла. На рис. 1 представлено такое распределение для кристалла диаметром 50 мм, выращенного методом Чохральского. V-образное распределение преципитатов кислорода и углерода соответствует параметру роста  $\zeta_{crit}$ , при  $V/G > \zeta_{crit}$  наблюдаются преципитаты и вакансионные микропоры внутри и выше V-образного распределения, а при  $V/G < \zeta_{crit}$  — преципитаты и межзельные дислокационные петли [1, 6].

Увеличение диаметра кристалла приводит к значительному изменению температурных условий роста и бездислокационному росту кристалла в ограниченном диапазоне скоростей [14]. В этом случае выполняются условия существования V-образного распределения (соответствует кольцевому распределению в плоскости (111)), когда внутри кольца существуют преципитаты и вакансионные микропоры, а за кольцом — преципитаты и межзельные дислокационные петли.

На этапе определения вида дефектной структуры программный комплекс работает следующим об-

разом. Вначале проводят выбор метода выращивания бездислокационных монокристаллов кремния (метод Чохральского или бестигельной зонной плавки), а затем задается определенный диаметр кристалла. Так как  $V/G = \zeta_{crit}$  теоретически и экспериментально определяется в некотором диапазоне значений ( $0,06 \leq \zeta_{crit} \leq 0,3 \text{ мм}^2/(\text{К} \cdot \text{мин})$ ), то для расчета выбираем некоторое значение  $\zeta_{crit}$ .

Для заданного диаметра в некоторых диапазонах значений выбирают значения осевого температурного градиента в центре кристалла  $G_a$ , а также минимальной и максимальной скорости роста кристалла. Для каждого диаметра кристалла эти значения определены из анализа экспериментальных и теоретических данных.

Далее проводят выбор осевого температурного градиента на краю кристалла  $G_e$  в диапазоне значений  $G_e/G_a = 1,0 \div 2,5$ . Параболическое радиальное распределение осевого температурного градиента имеет вид

$$G(r) = G_a + (G_e - G_a) \left( \frac{r}{R_s} \right)^2,$$

где  $R_s$  — радиус кристалла;  $r$  — текущая координата в диапазоне от 0 до  $R_s$ . Затем, исходя из зависимости  $V_{crit}(r)/G(r) = \zeta_{crit}$ , строится графическая зависимость критической скорости роста от радиуса кристалла.

Достоверность таких вычислений можно экспериментально проверить с помощью селективного травления плоскости кристалла, проходящей через

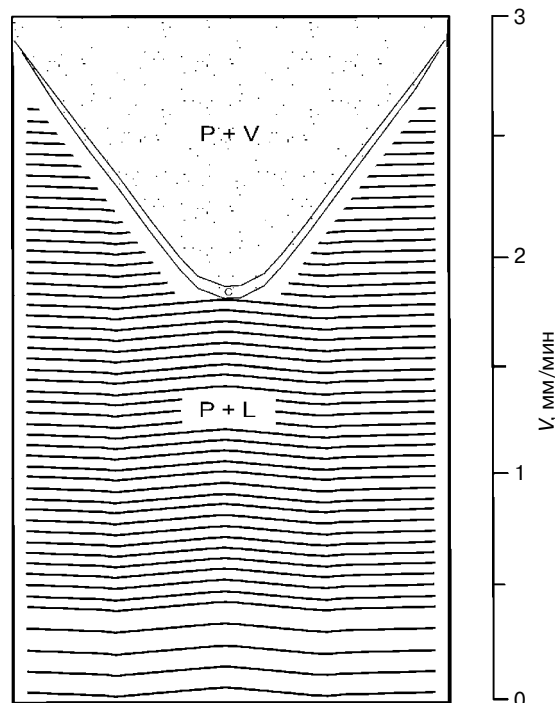


Рис. 1. Схема образования и трансформации ростовых микродефектов в монокристаллах кремния (рост по методу Чохральского, диаметр 50 мм, плоскость (112)): P — преципитаты кислорода и углерода; V — вакансионные микропоры; L — межзельные дислокационные петли; C — распределение преципитатов, когда параметр роста  $V/G = \zeta_{crit}$ .

центр кристалла и параллельной направлению выращивания. В случае наличия отклонений можно подбором параметров  $G_a$ ,  $G_e$ ,  $\zeta_{crit}$  добиться полного соответствия расчетных и экспериментальных данных. Кроме того, такая методика позволит избежать трудностей экспериментального определения  $G_a$  и  $G_e$ , особенно для кристаллов большого диаметра.

На последней стадии определения вида дефектной структуры для кристалла выбранного диаметра на полученную зависимость критической скорости роста накладывается значение реальной скорости роста кристалла, что позволяет определить вид дефектной структуры реального кристалла. В зависимости от положения прямой  $V = const$  относительно кривой  $V_{crit}(r)$  возможны три области дефектной структуры, расчет которых осуществляется расчетно-графическим блоком программного комплекса (рис. 2).

Первая область расчета характеризуется высокими скоростями роста кристалла, когда выше  $V$ -образного распределения образуются только вакансионные микропоры и преципитаты. Вторая область характеризуется средними скоростями роста кристалла, когда формируется кольцо преципитатов в плоскости, перпендикулярной к направлению роста. При этом внутри кольца образуются преци-

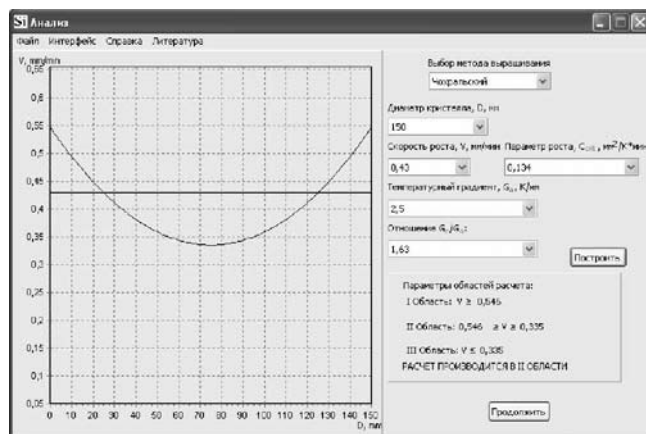


Рис. 2. Интерфейс программы для анализа дефектной структуры

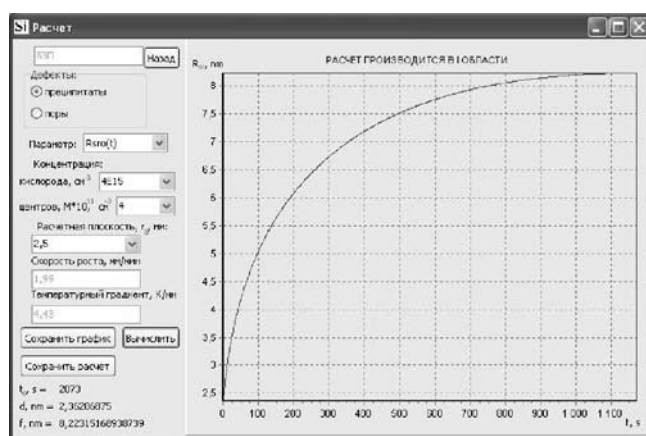


Рис. 3. Интерфейс программы для расчета дефектной структуры

питаты и вакансионные микропоры, а за кольцом — преципитаты и межузельные дислокационные петли. Третья область расчета характеризуется низкими скоростями роста кристалла, когда ниже  $V$ -образного распределения образуются преципитаты и межузельные дислокационные петли (рис. 2).

Расчет преципитатов проводят в рамках классической теории зарождения, роста и коалесценции преципитатов с использованием аналитических и приближенных вычислений. Определяют параметры, характеризующие процессы преципитации кислорода и углерода, например: критические радиусы преципитатов, функции распределения преципитатов по размерам, изменение среднего размера преципитатов во время охлаждения кристалла и другие (рис. 3). Математические модели и расчет параметров приведены в работах [4, 11, 13, 15].

При расчете вакансионных микропор вначале проводят проверку на наличие условий для их образования, так как микропоры не образуются при скорости охлаждения кристалла  $V_{охл} \geq 40$  К/мин [16] и в кристаллах диаметром менее 70 мм [6]. Расчет вакансионных микропор и межузельных дислокационных петель позволяет определить для каждого из этих видов дефектов такие параметры, как критический радиус, концентрации [11].

Достоинством расчетов образования и роста преципитатов, вакансионных микропор и межузельных дислокационных петель является то, что входными и управляющими параметрами расчетно-графической части являются ростовые параметры: скорость роста кристалла и осевой температурный градиент, который выбирают в некотором диапазоне значений в зависимости от диаметра выращиваемого кристалла. Из трех ростовых параметров два параметра строго определены (диаметр кристалла и скорость его роста), а осевой температурный градиент задается в некотором интервале значений. Эта неопределенность значения осевого температурного градиента вносит погрешность в анализ и расчет образования ростовых микродефектов, которую можно уменьшить, если экспериментально определить значения  $G_a$  и  $G_e$  во время роста кристалла. Кроме того, свой вклад в общую погрешность виртуального экспериментального прибора вносят погрешности используемых приближенных вычислительных методов.

### Применение и рекомендации по использованию программного комплекса

Разработка программного комплекса для анализа и расчета образования ростовых микродефектов в бездислокационных монокристаллах кремния стала возможной после создания модели преципитации во время охлаждения кристалла после выращивания. Эта модель совместно с кинетическими моделями образования и роста межузельных дислокационных петель и вакансионных микропор позволяет теорети-

чески описать процессы образования и трансформации ростовых микродефектов в бездислокационных монокристаллах кремния любого диаметра, полученных с помощью методов бестигельной зонной плавки и Чохральского [4, 11, 15].

Созданный программный продукт позволяет экономить значительные средства и время, которые уходили на проведение экспериментальных исследований дефектной структуры с помощью оптической и просвечивающей электронной микроскопии, рентгеновских методов наблюдения дефектов. Именно экспериментальные трудности обнаружения и определения индивидуальных характеристик сверхмалых ростовых микродефектов привели к тому, что более изученными до настоящего времени являлись постростовые микродефекты, которые образуются после различных технологических воздействий (термические обработки, облучение кристаллов) [17]. Поскольку постростовые микродефекты — это в первую очередь результат трансформации исходной ростовой дефектной структуры, то появляется возможность создания в будущем программного комплекса для анализа и расчета постростовых микродефектов, основой которого будет разработанный авторами программный продукт.

Адекватность разработанной триады «математическая модель — алгоритм — программа» исходной физической модели удостоверена путем сравнения результатов расчетных экспериментов с результатами физических исследований [1, 8]. Поэтому замена экспериментальных исследований структуры адекватными им теоретическими исследованиями с помощью программного комплекса позволяет говорить о том, что комплекс является новым виртуальным экспериментальным прибором. Так как методика применения программного продукта оригинальна, то она представляет собой новую технику эксперимента.

Программный комплекс осуществляет имитацию реального эксперимента, с максимальной точностью воспроизводящую реальные характеристики процесса выращивания монокристаллов кремния. Он позволяет прогнозировать и управлять дефектной структурой кристалла. Предложенный в программном комплексе подход к анализу и расчету процессов дефектообразования при выращивании бездислокационных монокристаллов кремния имеет важное преимущество в простоте, доступности и достаточной адекватности математического моделирования по сравнению с другими методами исследования. Для его реализации не требуются суперкомпьютеры, и можно эффективно использовать экспериментальные данные, опыт и интуицию физиков, материаловедов и технологов для аналитического расчета и конструирования дефектной структуры, образующейся в процессе охлаждения во время роста кристалла. Программный комплекс несложно реализовать на персональном компьютере в технологической и исследовательской практике.

## Заключение

Показано, что разработанный программный комплекс является примером использования виртуального экспериментального прибора для исследования реальной структуры бездислокационных монокристаллов кремния. В настоящее время его можно применять для анализа и расчета дефектной структуры нелегированных монокристаллов кремния. Созданный программный комплекс выступает как базис, улучшением и уточнением которого (например, учетом, в процессе взаимодействия точечных дефектов, атомов легирующей примеси, переходных металлов, азота и др.) можно расширять и оптимизировать процесс моделирования. Следовательно, программный комплекс для анализа и расчета образования ростовых микродефектов является универсальным, гибким и недорогим инструментом, который позволяет описать и построить реальные процессы дефектообразования в бездислокационных монокристаллах кремния. Он дает практические рычаги управления дефектной структурой совершенных бездислокационных монокристаллов кремния непосредственно во время роста кристалла.

## Библиографический список

1. **Talanin, V. I.** Formation of grown-in microdefects in dislocation-free silicon monocrystals / V. I. Talanin, I. E. Talanin // *New research on semiconductors*. – N. Y. : Nova Sci. Publ. Inc., 2006. – P. 31–67.
2. **Prostomolotov, A. I.** Simplistic approach for 2D grown-in microdefects modeling / A. I. Prostomolotov, N. A. Verezub // *Phys. status solidi (c)*. – 2009. – V. 6, N 8. – P. 1878–1881.
3. **Kulkarni, M. S.** Quantification of defect dynamics in unsteady-state and steady-state Czochralski growth of monocrystalline silicon / M. S. Kulkarni, V. Voronkov, R. Falster // *J. Electrochem. Soc.* – 2004. – V. 151, N 5. – P. G663–G669.
4. **Talanin, V. I.** Kinetics of high-temperature precipitation in dislocation-free silicon single crystals / V. I. Talanin, I. E. Talanin // *Phys. Solid State*. – 2010. – V. 52, N 10. – P. 2063–2068.
5. **Kulkarni, M. S.** Simplified two-dimensional quantification of the microdefect distributions in silicon crystals grown by the Czochralski process / M. S. Kulkarni, V. V. Voronkov // *High purity silicon VIII*. – N. Y. : Electr. Soc., 2004. – P. 71–95.
6. **Talanin, V. I.** Modeling of defect formation processes in dislocation-free silicon single crystals / V. I. Talanin, I. E. Talanin // *Crystallography Rep.* – 2010. – V. 55, N 4. – P. 632–637.
7. **Talanin, V. I.** On the recombination of intrinsic point defects in dislocation-free silicon single crystals / V. I. Talanin, I. E. Talanin // *Phys. Solid State*. – 2007. – V. 49, N 3. – P. 467–470.
8. **Talanin, V. I.** Mechanism of formation and physical classification of the grown-in microdefects in semiconductor silicon / V. I. Talanin, I. E. Talanin // *Defect and diffusion forum*. – 2004. – V. 230–232, N 1. – P. 177–198.
9. **Voronkov, V. V.** Nucleation of oxide precipitates in vacancy containing silicon / V. V. Voronkov, R. J. Falster // *J. Appl. Phys.* – 2002. – V. 91, N 9. – P. 5802–5810.
10. **Sinno, T.** Point defects dynamics and the oxidation-induced stacking-faults in Czochralski-grown silicon crystals / T. Sinno, R. A. Brown, W. von Ammon, E. Dornberger // *J. Electrochem. Soc.* – 1998. – V. 145, N 1. – P. 302–306.
11. **Talanin, V. I.** Kinetics of formation of vacancy microvoids and interstitial dislocation loops in dislocation-free silicon crystals / V. I. Talanin, I. E. Talanin // *Phys. Solid State*. – 2010. – V. 52, N 9. – P. 1880–1886.
12. **Voronkov, V. V.** Mechanism of swirl defects formation in silicon / V. V. Voronkov // *J. Crystal Growth*. – 1982. – V. 59, N 3. – P. 625–642.

- 
13. **Talanin, V. I.** About formation of grown-in microdefects in dislocation-free silicon single crystals / V. I. Talanin, I. E. Talanin, A. A. Voronin // *Can. J. Phys.* – 2007. – V. 85, N 12. – P. 1459–1471.
14. **von Ammon, W.** Bulk properties of very large diameter silicon single crystal. / W. von Ammon, E. Dornberger, P. O. Hansson // *J. Cryst. Growth.* – 1999. – V. 198–199, N 1–4. – P. 390–398.
15. **Talanin, V. I.** Kinetic model of growth and coalescence of oxygen and carbon precipitates during cooling of as-grown silicon crystals / V. I. Talanin, I. E. Talanin // *Phys. Solid State.* – 2010. – V. 52, N 9. – P. 1880–1886.
16. **Nakamura, K.** Grown-in defects in silicon crystals / K. Nakamura, T. Saishoji, J. Tomioka // *J. Cryst. Growth.* – 2002. – V. 237–239, N 1. – P. 1678–1684.
17. **Brown, R. A.** Engineering analysis of microdefects formation during silicon crystal growth / R. A. Brown, Z. Wang, T. Mori // *J. Cryst. Growth.* – 2001. – V. 225, N 1. – P. 97–112.