

**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**  
**САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ**  
**ЭЛЕКТРОТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ**  
**«ЛЭТИ» ИМ. В.И. УЛЬЯНОВА (ЛЕНИНА)**  
**Кафедра МНЭ**

**ОТЧЕТ**  
**по лабораторной работе №1**  
**по дисциплине «ТМиЭТ»**  
**Тема: Расчет процесса роста, легирования и синтеза**  
**полупроводниковых соединений**

Студент гр. 5209

\_\_\_\_\_

Хабибулин А.Р.

\_\_\_\_\_

Дерий И.А.

Преподаватель

\_\_\_\_\_

Александрова О.А.

Санкт-Петербург

2018

### Цель работы.

Проанализировать характер распределения примеси вдоль слитка в методе Чохральского при изменении технологических условий выращивания; исследовать зависимость эффективного коэффициента распределения от параметров технологического процесса.

### Основные теоретические положения.

Схема выращивания кристалла методом вытягивания из расплава приведена на рисунке 1. Суть метода состоит в следующем. Исходный поликристаллический материал загружают в тигель, затем расплавляют в герметичной камере в вакууме или инертной атмосфере. Непосредственно перед началом выращивания кристалла расплав выдерживают при температуре несколько выше температуры плавления для очистки от летучих примесей, которые, испаряясь из расплава, осаждаются на холодных частях камеры.

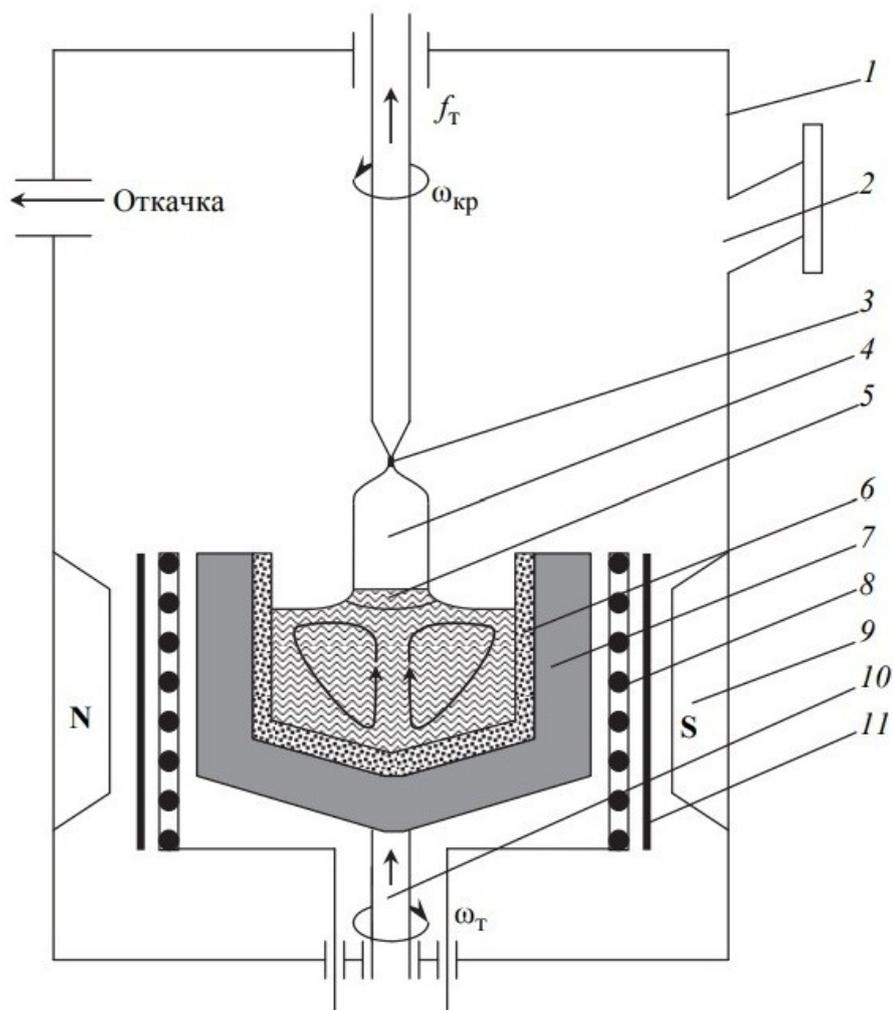


Рис. 1. Схема установки для выращивания кристаллов методом Чохральского

- 1 – камера роста, 2 – смотровое окно, 3 – затравка, 4 – монокристалл,  
5 – переохлажденный столбик расплава, 6 – тигель из кварцевого стекла,

7 – графитовый стакан, 8 – резистивный нагреватель, 9 – источник магнитного поля, 10 – устройство подъема и вращения тигля, 11 – тепловые экраны

Далее затравку прогревают, выдерживая ее над расплавом для предотвращения термоудара в момент контакта холодной затравки с поверхностью расплава. Затравка представляет собой монокристалл высокого структурного совершенства с минимальной плотностью дислокаций, который вырезается в строго определенном кристаллографическом направлении. Термоудар затравки может привести к увеличению в ней плотности дислокаций, которые прорастают в выращиваемый кристалл, ухудшая его структурное совершенство. Поверхностные нарушения, возникающие при вырезании затравки, удаляют химическим травлением.

После прогрева затравку погружают в расплав и оплавливают для удаления поверхностных загрязнений. Процесс вытягивания кристалла начинают с формирования шейки монокристалла, представляющей собой тонкий монокристалл. Диаметр шейки не должен превышать линейного размера поперечного сечения затравки, длина должна составлять несколько ее диаметров.

Шейку формируют с одновременным понижением температуры расплава с большой линейной скоростью и при больших осевых градиентах температуры. Это приводит к пересыщению вакансиями области монокристалла вблизи фронта кристаллизации, что при соответствующей кристаллографической ориентации затравки облегчает движение и выход на поверхность кристалла дислокаций, проросших из затравки. Для этого затравка должна быть ориентирована так, чтобы плоскости скольжения дислокаций располагались под как можно большими углами к направлению роста кристалла. Такими плоскостями в решетке алмаза являются плоскости  $\{111\}$ .

Следующей после формирования шейки операцией является разращивание монокристалла от размеров шейки до номинального диаметра слитка, т. е. выход на диаметр. Для предотвращения увеличения плотности дислокаций угол разращивания делают довольно малым. После выхода на диаметр условия выращивания кристалла стабилизируют с целью получения слитка постоянного диаметра и высокого структурного совершенства. На данном этапе тепловые условия процесса определяют градиенты температуры в кристалле и расплаве, от которых, в свою очередь, зависят форма фронта кристаллизации, размеры переохлажденной области, диаметр и скорость вытягивания кристалла ( $f_T$  на рисунке 1).

После выращивания кристалла заданных диаметра и длины формируют обратный конус, плавно уменьшая диаметр кристалла, для того чтобы при отрыве кристалла от расплава предотвратить тепловой удар, приводящий к размножению дислокаций в его конечной части. Далее кристалл медленно

охлаждают, для чего его поднимают на небольшое расстояние над расплавом и медленно снижают температуру нагревателя. Для обеспечения осевой симметрии теплового поля в расплаве в течение всего процесса выращивания тигль и кристалл одновременно вращают в противоположных направлениях.

Чтобы подавить движение потоков жидкости в электропроводящем расплаве и предотвратить неоднородное распределение примеси в растущем кристалле, тигель с расплавом помещают в магнитное поле, которое тормозит движение проводящего расплава.

### Обработка результатов эксперимента.

1. Построить зависимость  $C_{тв}(g)$  для различных скоростей кристаллизации  $S_i$ , легированного  $As$ . Скорость вращения кристалла относительно тигля 60 об/мин. Скорость кристаллизации 0,5; 5; 10 мм/мин. Начальная концентрация примеси в расплаве  $10^{15} \text{ см}^{-3}$ . Построить график зависимости  $k_{эфф}$  как функции скорости кристаллизации при скорости вращения кристалла относительно тигля 60 об/мин.

Таблица 1

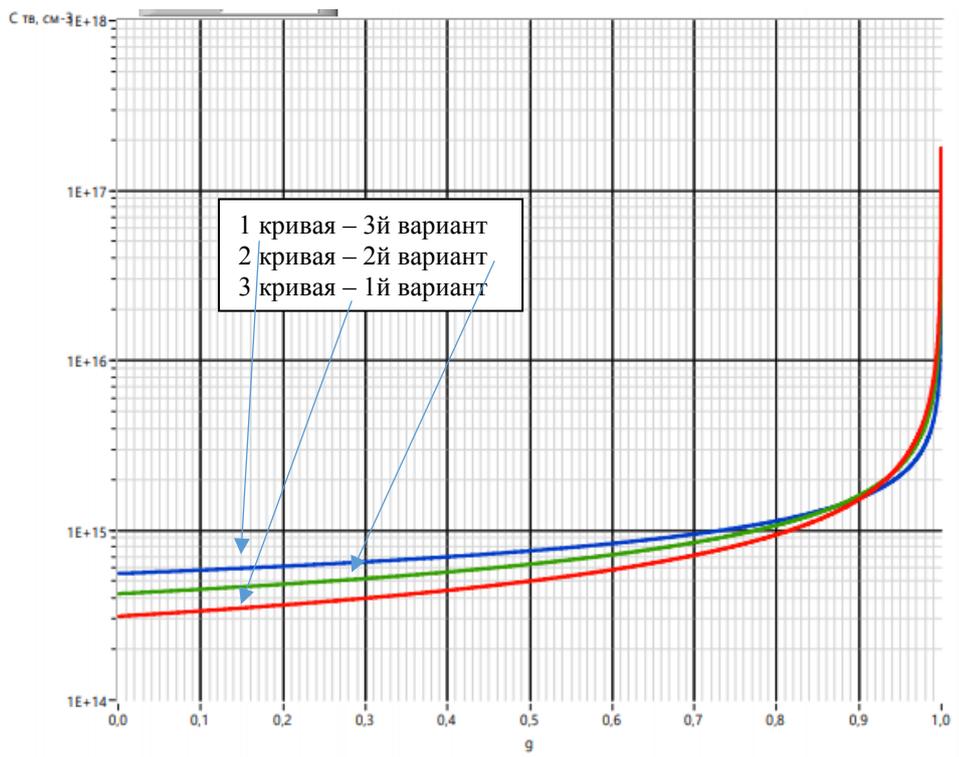
Расчетные данные пункта 1 лабораторной работы

Скорость кристаллизации $f$ , мм/мин	$f_1 = 0,5$	$f_2 = 5$	$f_3 = 10$
$k_{эфф}$	0,31138	0,42283	0,55601

Построим зависимости  $C_{тв}(g)$  и  $k_{эфф}$  в соответствии с вышеуказанными параметрами технологического процесса:

Рис. 2. Зависимость  $C_{тв}(g)$  для кристалла Si легированного As

1 – при  $f_1 = 0,5$  мм/мин, 2 – при  $f_2 = 5$  мм/мин, 3 – при  $f_3 = 10$  мм/мин



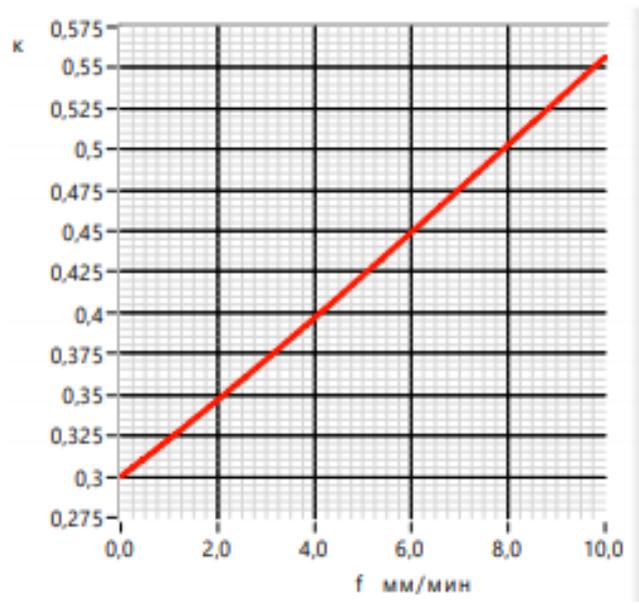


Рис. 3. Зависимость  $k_{эфф}$  от скорости кристаллизации

2. Построить зависимость  $C_{тв}(g)$  для кристалла Si, легированного As. Скорость кристаллизации 5 мм/мин. Скорость вращения кристалла относительно тигля 20; 50; 120 об/мин. Начальная концентрация примеси в расплаве  $10^{15} \text{ см}^{-3}$ . Построить график зависимости толщины диффузионного слоя  $\delta$  и  $k_{эфф}$  как функции вращения кристалла относительно тигля (для  $k_{эфф}$  скорость кристаллизации составляет 5 мм/мин).

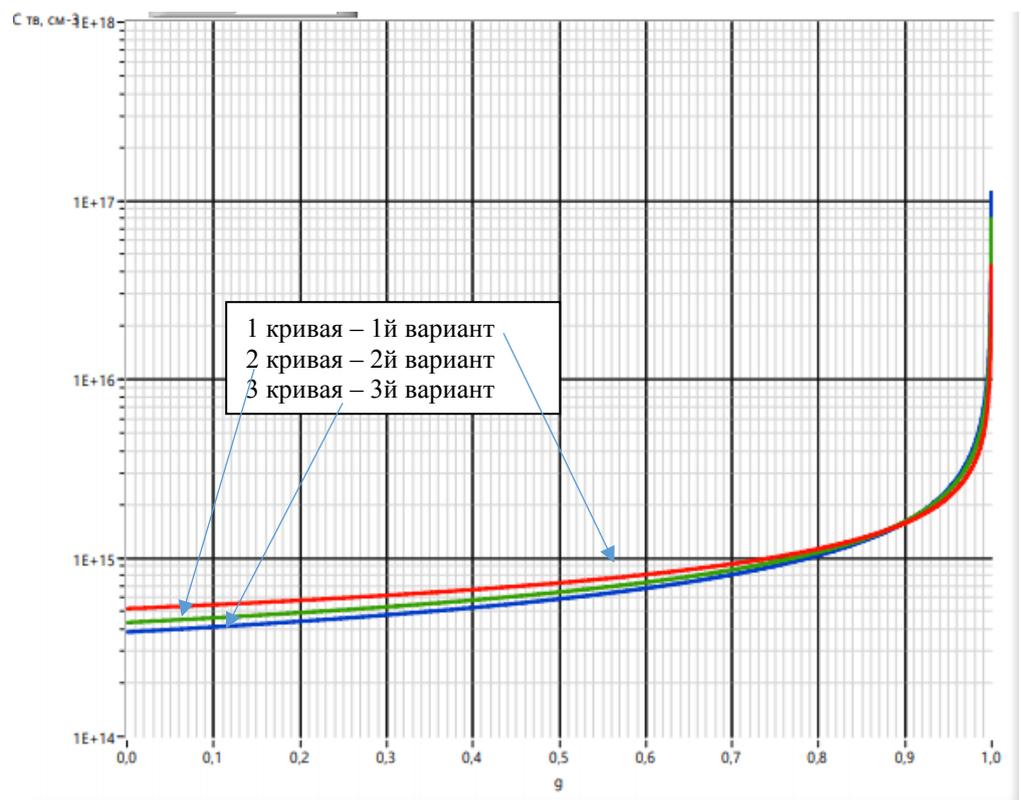


Рис. 4. Зависимость  $C_{тв}(g)$  для кристалла Si легированного As

1 – при  $\omega_1 = 20$  об/мин, 2 – при  $\omega_2 = 50$  об/мин, 3 – при  $\omega_3 = 120$  об/мин

Таблица 2

Расчетные данные

$\omega$ , об/мин	$\omega_1 = 20$	$\omega_1 = 50$	$\omega_1 = 120$
$k_{эфф}$	0,52032	0,43537	0,38505
$\delta$ , см	0,02076	0,01692	0,01092

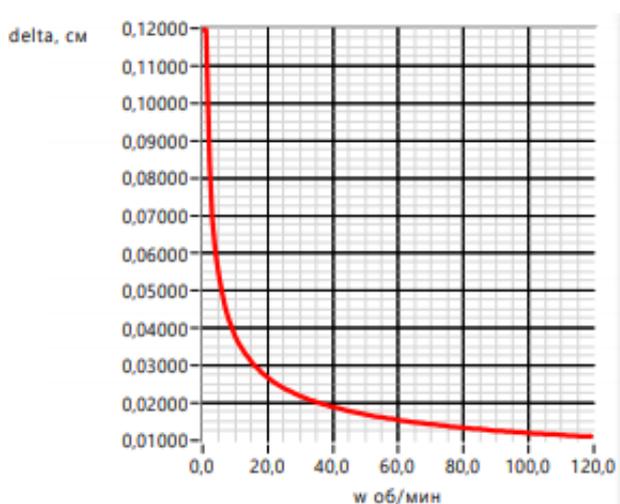


Рис. 5. Зависимость  $\delta$  от  $\omega$

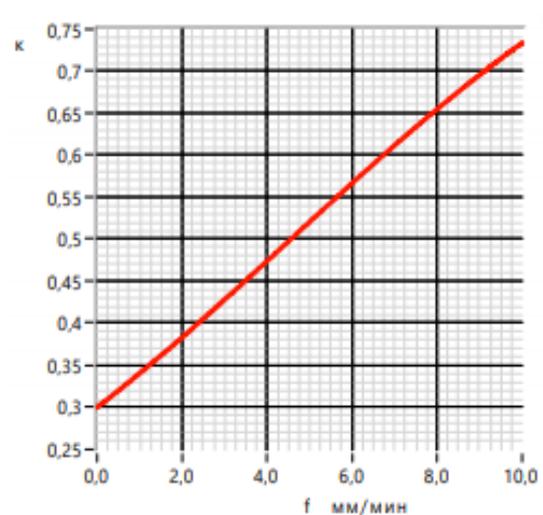


Рис. 6. Зависимость  $k_{эфф}$  от  $\omega$

3. Рассчитать значение равновесного коэффициента распределения указанной в задании примеси в рамках модели регулярных растворов, применяя для твердой фазы приближение регулярных растворов, а для жидкой – квазирегулярных.

Общая формула для расчета приведена ниже:

$$\ln(k_0) = \frac{\Delta H_{плB}}{R} \left( \frac{1}{T_{плA}} - \frac{1}{T_{плB}} \right) + \frac{a_{жс} - b_{жс} T_{плA} - W_{тAB}}{R T_{плA}}, \quad (1)$$

где  $\Delta H_{плB}$  – энтальпия плавления чистого компонента В;  $T$  – температура ликвидус твердого раствора "полупроводник – примесь";  $T_{плB}$  – температура плавления чистого компонента В;  $\gamma_{тв}$  и  $\gamma_{жв}$  – коэффициенты активности компонента В в равновесных твердой и жидкой фазах;  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $R = 8,314$  Дж/(моль·К).

Имеем следующие данные:  $\Delta H_{плB} = 27,686$  кДж/моль;  $T_{плA} = 1685$  К;  $T_{плB} = 1090$  К;  $a_{жс} = -210$  кДж/моль;  $b_{жс} = 135,8 \cdot 10^{-3}$  кДж/(моль · К);  $W_{mAB} = 24,9$  кДж/моль.

Подставляя значения в формулу 1 получаем:

$$\ln(k_0) = \frac{27,686 \cdot 10^3}{8,314} \left( \frac{1}{1685} - \frac{1}{1090} \right) + \frac{-210 \cdot 10^3 + 135,8 \cdot 1685 - 24,9 \cdot 10^3}{8,314 \cdot 1685} = -0,43;$$

Тогда для равновесного коэффициента распределения имеем:

$$k_0 = \exp(-0,43) \approx 0,64.$$

4. Построить зависимость  $C_{mв} = f(g)$  для кристалла ГЭФ-4,8 при следующих параметрах технологического процесса: скорость кристаллизации 0,5 мм/мин; скорость вращения кристалла относительно тигля 50 об/мин; диаметр кристалла 2 см; диаметр тигля 6, 8 и 10 см. Начальную концентрацию примеси в расплаве определить по указанному значению удельного сопротивления и условий технологического процесса.

Таблица 3

Расчетные данные пункта 4 лабораторной работы

$D_{\text{тигля}}$	$F, \text{ см}^2$	$k_{\text{эфф}}$	$k_{\text{и}}$	$k_{\text{об}}$
$D_{\text{тигля 1}} = 6 \text{ см}$	25,14	0,09115	1,15205	1,24320
$D_{\text{тигля 2}} = 8 \text{ см}$	47,13	0,09115	2,16009	2,25124
$D_{\text{тигля 3}} = 10 \text{ см}$	75,4	0,09115	3,45614	3,54729

Для нахождения площади испарения  $F$  воспользуемся формулой (2):

$$F = \frac{\pi D_{\text{тигля}}^2}{4} - \frac{\pi D_{\text{кристалла}}^2}{4}. \quad (2)$$

Полученные значения представлены в таблице 3. Далее вычислим начальную концентрацию примеси в расплаве. Используем при решении следующие выражения:

$$\rho = \frac{1}{e \cdot n \cdot \mu} \rightarrow n = \frac{1}{\rho \cdot e \cdot \mu} = C_{As}^m, \quad (3)$$

$$C_{As}^m = k_{\text{эфф}} \cdot C_0^{As} \rightarrow C_0^{As} = \frac{C_{As}^m}{k_{\text{эфф}}}, \quad (4)$$

$$k_{\text{эфф}} = \frac{k_0}{k_0 + (1 - k_0) \cdot \exp\left(\frac{-f \cdot \delta}{D}\right)}, \quad (5)$$

$$\delta = 1,6 \cdot D^{\frac{1}{3}} \cdot \nu^{\frac{1}{6}} \cdot \omega^{\frac{-1}{2}} \cdot (6)$$

Здесь  $\rho$  – удельное сопротивление кристалла ГЭФ-4,8, которое равно  $1,8 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ ;  $e$  – элементарный электрический заряд, равный  $1,6 \cdot 10^{19} \text{ Кл}$ ;  $n = C_p^m$  – концентрация носителей заряда в кристалле;  $\mu$  – подвижность электронов (электронный тип проводимости в кристалле ГЭФ), равная  $3300 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ ;  $k_0$  – равновесный коэффициент распределения, равный  $3 \cdot 10^{-3}$ ;  $f$  – скорость кристаллизации, равная  $0,5 \text{ мм/мин}$ ;  $\delta$  – толщина диффузионного слоя;  $D$  – коэффициент диффузии, равный  $5,5 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$ ;  $\nu$  – кинематическая вязкость расплава, равная  $1,35 \cdot 10^{-3} \text{ см}^2/\text{с}$ ;  $\omega$  – скорость вращения кристалла относительно тигля, равная  $50 \text{ об/мин}$ . **Получим  $C^T = 4,328 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ .**

Построим зависимость  $C_{\text{ТВ}} = f(g)$  для кристалла ГЭФ-4,8:

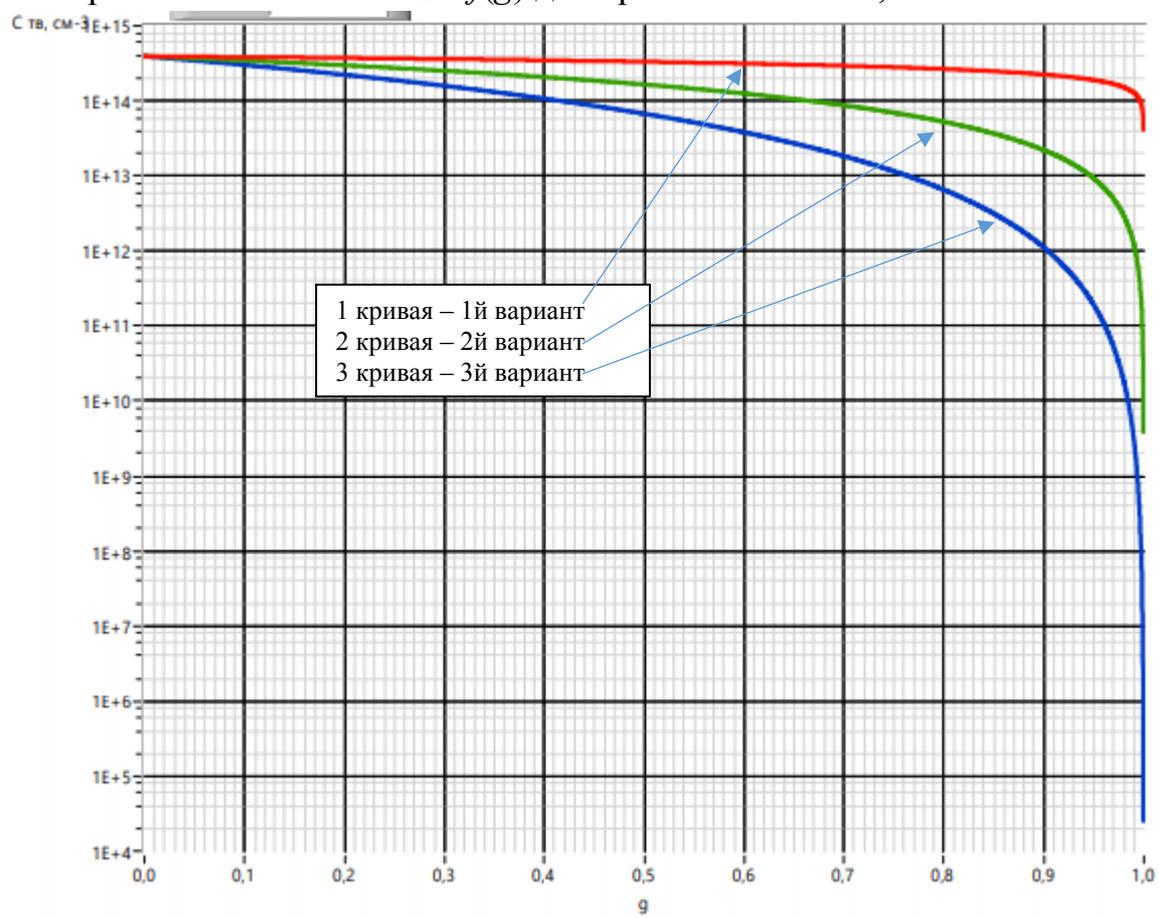


Рис. 7. Зависимость  $C_{\text{ТВ}}(g)$  для кристалла ГЭФ-4,8  
1 – при  $D_{\text{тигля}} = 6 \text{ см}$ , 2 – при  $D_{\text{тигля}} = 8 \text{ см}$ , 3 – при  $D_{\text{тигля}} = 10 \text{ см}$

5. Построить зависимость  $C_{\text{ТВ}} = f(g)$  для кристалла ГЭФ-4,8 при следующих параметрах технологического процесса: скорость вращения кристалла относительно тигля  $50 \text{ об/мин}$ ; диаметр кристалла  $2 \text{ см}$ ; диаметр тигля  $10 \text{ см}$ ; скорость кристаллизации  $0,5$ ;  $6$ ;  $10 \text{ мм/мин}$ . Начальную

концентрацию примеси в расплаве взять из пункта 4. Построить графики зависимости  $k_{эфф}$  и  $k_{об}$  от скорости кристаллизации.

Таблица 4

Расчетные данные пункта 5 лабораторной работы

$f$ , мм/мин	$k_{эфф}$	$k_{и}$	$k_{об}$
$f_1$	0,09115	3,45614	3,54729
$f_2$	0,32527	0,28801	0,61328
$f_3$	0,6016	0,17281	0,77441

Построим графики зависимостей  $C_{ТВ} = f(g)$  для кристалла ГЭФ-4,8,  $k_{эфф}$  и  $k_{об}$  от скорости кристаллизации.

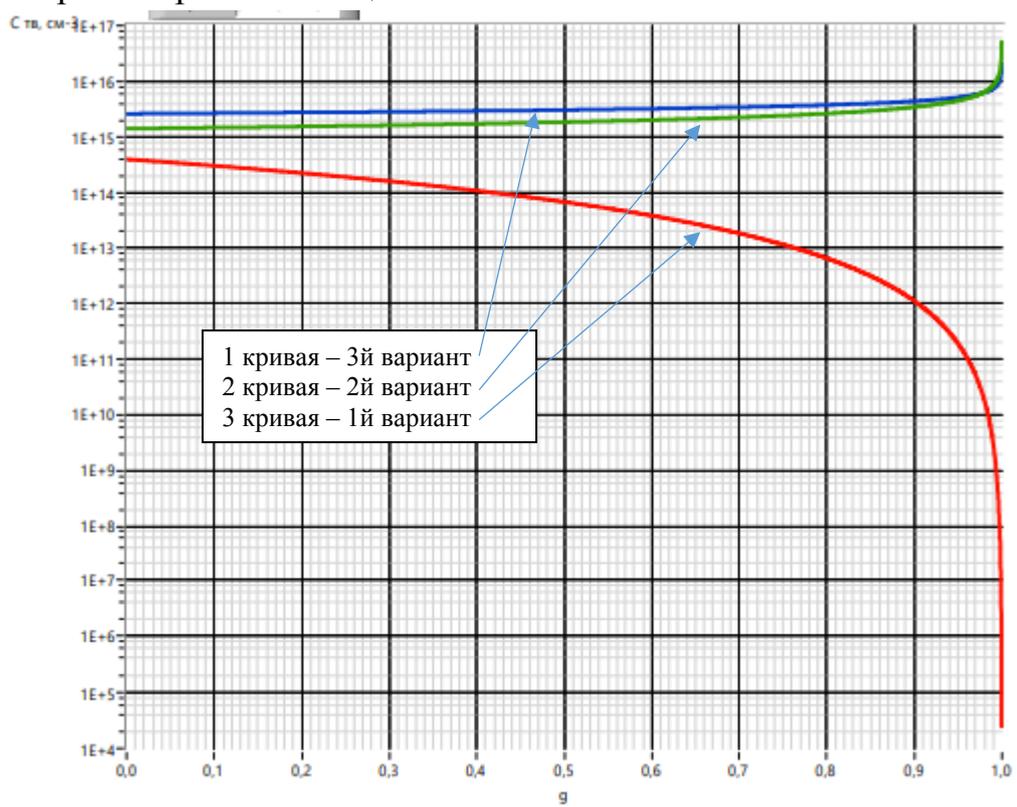


Рис. 8. Зависимость  $C_{ТВ}(g)$  для кристалла ГЭС-1,8  
1 – при  $f = 0,5$  мм/мин, 2 – при  $f = 6$  мм/мин, 3 – при  $f = 10$  мм/мин

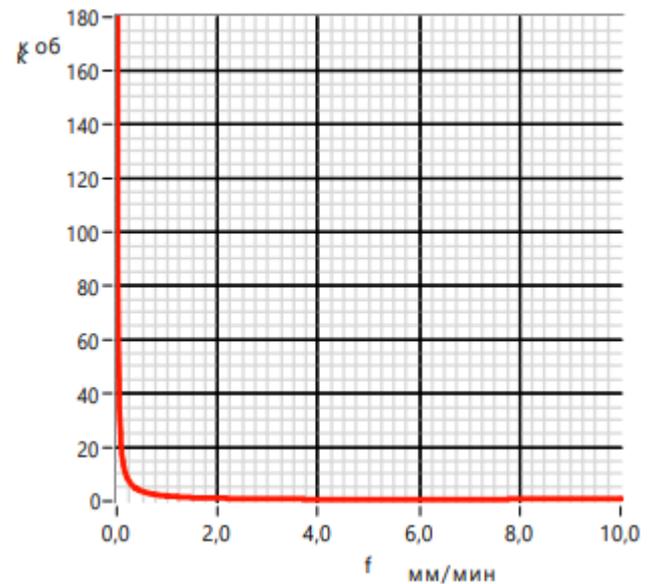
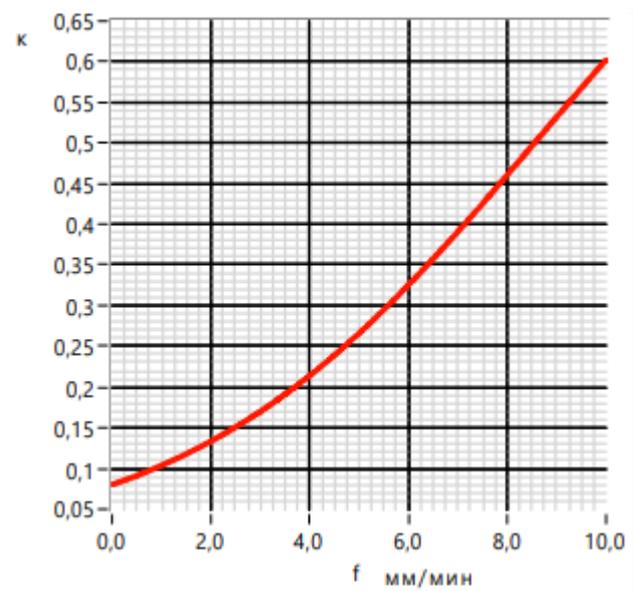


Рис. 9. Зависимость  $k_{эфф}$  от  $f$  (мм/мин)    Рис. 10. Зависимость  $k_{об}$  от  $f$  (мм/мин)

6. Определить технологический режим выращивания кристалла, в котором реализуется метод компенсационного испарения.

$$k_{об} = k_u + k_{эфф} = \frac{\alpha \cdot F}{f \cdot S} + \frac{k_0}{k_0 + (1 - k_0) \cdot \exp\left(\frac{-f \cdot \delta}{D}\right)} = 1. \quad (7)$$

Здесь  $k_u$  – коэффициент испарения;  $\alpha$  – линейный коэффициент испарения, равный  $1,2 \cdot 10^{-4}$  см/с;  $F$  – площадь поверхности испарения;  $S$  – поперечное сечение кристалла.

$$k_{об} = \frac{\alpha \cdot \frac{\pi \cdot D_{муз}^2}{4}}{f \cdot \frac{\pi \cdot D_{кр}^2}{4}} + \frac{k_0}{k_0 + (1 - k_0) \cdot \exp\left(\frac{-f \cdot 1,6 \cdot D^{\frac{1}{3}} \cdot v^{\frac{1}{6}} \cdot \omega^{\frac{-1}{2}}}{D}\right)} = 1;$$

$$k_{об} = \frac{\alpha \cdot D_{муз}^2}{f \cdot D_{кр}^2} + \frac{k_0}{k_0 + (1 - k_0) \cdot \exp\left(-f \cdot 1,6 \cdot D^{\frac{-2}{3}} \cdot v^{\frac{1}{6}} \cdot \omega^{\frac{-1}{2}}\right)} = 1.$$

<b><math>\alpha</math></b>	$1,2 \cdot 10^{-4} \text{ м/с}$
<b><math>D_{\text{тиг}}</math></b>	15 см
<b><math>D_{\text{кр}}</math></b>	5 см
<b><math>k_0</math></b>	$8 \cdot 10^{-2}$
<b><math>D</math></b>	$5 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$
<b><math>w</math></b>	5,235 рад/с
<b><math>V</math></b>	$1,35 \cdot 10^{-3} \text{ см}^2/\text{с}$
<b><math>f</math></b>	1,051 мм/мин

$$\alpha := 1.2 \cdot 10^{-4}$$

$$D := 5 \cdot 10^{-5}$$

$$k_0 := 8 \cdot 10^{-2}$$

$$\delta_{\text{св}} := 0.01263$$

$$D_{\text{кр}} := 5$$

$$D_{\text{тиг}} := 15$$

$$S_{\text{св}} := \frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{кр}}^2$$

$$F_{\text{св}} := \frac{\pi}{4} \cdot (D_{\text{тиг}}^2 - D_{\text{кр}}^2)$$

$$k_i(f) := \frac{\alpha \cdot F}{S \cdot f} \quad k(f) := \frac{k_0}{k_0 + (1 - k_0) \cdot e^{-f \cdot \frac{\delta}{D}}}$$

$$k_{\text{sum}}(f) := k_i(f) + k(f)$$

$$f_{\text{иск}} := \text{root}[(k_{\text{sum}}(f) - 1), f] = 1.751 \times 10^{-3}$$

$$f_{\text{иск\_об}} := f_{\text{иск}} \cdot 600 = 1.051 \quad \frac{\text{мм}}{\text{мин}}$$

При таких величинах параметров технологического процесса реализуется метод компенсационного испарения.

## **Вывод.**

В ходе лабораторной работы были получены зависимости, необходимые для понимания основ легирования кристаллов при их выращивании методом Чохральского. Построены зависимости:

1) концентрации примеси As в Si в твердой фазе при различных скоростях кристаллизации. Результаты построения представлены на рисунке 2. Видно, что увеличение скорости кристаллизации кристалла влечет за собой рост начального уровня концентрации примеси в кристалле. При этом наблюдается рост концентрации с увеличением доли примеси в кристалле.

2) концентрации примеси As в Si в твердой фазе при различных скоростях вращения кристалла относительно тигля. Результаты построения представлены на рисунке 4. Очевидно, что увеличение скорости кристаллизации кристалла приводит к тому, что происходит снижение начальной величины концентрации примеси в кристалле. Увеличение доли примеси является фактором, приводящим к увеличению ее концентрации в кристалле.

3) концентрации примеси P в Ge в твердой фазе при разных диаметрах тигля. Результаты построения представлены на рисунке 7. Можно сказать, что увеличение значения  $D_{\text{тиг}}$  приводит к более сильной скорости снижения концентрации примеси в кристалле с увеличением ее доли в нем. Стоит отметить, что происходит именно спад  $C_{\text{тв}}$ .

4) концентрации примеси P в Ge в твердой фазе при различных скоростях кристаллизации. Результаты построения представлены на рисунке 8. Видно, что увеличение скорости кристаллизации кристалла влечет за собой рост начального уровня концентрации примеси в кристалле. При этом наблюдается рост концентрации с увеличением доли примеси в кристалле при  $k_{\text{об}} < 1$  и спад при  $k_{\text{об}} > 1$ . При этом исходя из формулы (7), следует то, что между значениями скоростей кристаллизации 0,5 мм/мин и 6 мм/мин находится такое ее значение, которое приводит к равенству выражения – единице. Это является знаком того, что кристалл однородно легирован примесью. Совокупность параметров технологического процесса, приводящих к этому, определяет так называемый метод компенсационного испарения.