

05

О возможном механизме роста монокристаллов из расплава в условиях невесомости

© С.В. Котов, А.Р. Лютиков, Ю.П. Хухрянский, И.Н. Арсентьев,
Е.А. Кузнецова

Воронежский государственный технический университет
E-mail: kotov@vmail.ru

Поступило в Редакцию 24 января 2002 г.

Сообщается о возможном механизме роста монокристаллов полупроводников из расплавов в условиях невесомости. Приведены результаты компьютерного моделирования методом молекулярной динамики тонкого слоя расплава на поверхности монокристалла. Полученные основные характеристики динамики компонентов расплава позволяют выявить механизмы, при которых рост монокристаллов будет происходить во многом за счет атомов или малоатомных кластеров, что и повлияет на совершенство кристаллической структуры растущего монокристалла.

В последнее время уделяется большое внимание теории и практике роста монокристаллов полупроводников в условиях невесомости. Такой интерес оправдан, поскольку в этом случае можно получать монокристаллы с весьма совершенной структурой. Однако реальный процесс выращивания в невесомости кристаллов полупроводников весьма дорог. Это объясняется, во-первых, высокой стоимостью эксперимента по определению некоторых важных технологических параметров процесса кристаллизации и, во-вторых, затруднениями при моделировании процесса кристаллизации из-за отсутствия сложившейся теории роста монокристаллов в условиях невесомости.

В настоящем сообщении рассмотрен возможный механизм роста монокристаллов полупроводников из расплава в условиях невесомости.

Известно, что поверхностные атомы подложки образуют силовое поле, которое способствует образованию на этой поверхности подвижных групп атомов (кластеров) кристаллизующегося вещества [1]. Эти группы слабо связаны с подложкой и совершают хаотическое движение в расплаве у поверхности подложки. По мере удаления от

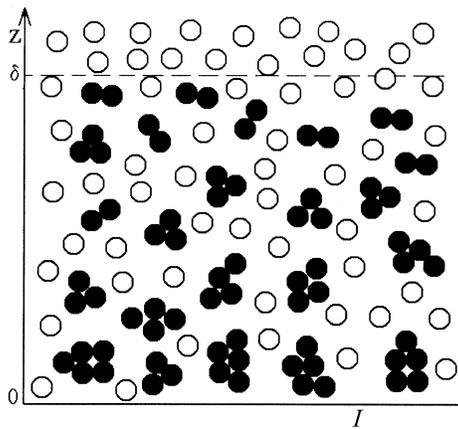


Рис. 1. Схема структуры δ -слоя расплава. I — подложка.

поверхности подложки они распадаются на отдельные атомы. Очевидно, что на некотором расстоянии δ от подложки влияние поля подложки существенно ослабевает и вероятность ассоциации атомов в кластер будет крайне мала, в то время как вероятность распада кластера на отдельные атомы будет значительна. В свою очередь непосредственно над поверхностью кристаллизации потенциал поля максимален, что приводит к высокой вероятности ассоциации атомов в кластер и низкой вероятности распада этого кластера.

Динамический процесс образования и распада кластеров происходит в δ -слое расплава, находящегося в термодинамическом равновесии с подложкой. На рис. 1 схематично представлено распределение атомов и кластеров по толщине δ -слоя в условиях невесомости. Видно, что градиенты концентраций атомов и кластеров имеют различное направление. При понижении температуры термодинамическое равновесие нарушается и приповерхностные атомы и кластеры осаждаются на подложку (I).

Рассмотрим динамику этого процесса. Изменение числа частиц в кластере будет определяться вероятностями образования и распада кластера. Как уже было отмечено выше, образование кластеров обусловлено наличием силового поля подложки. Предполагалось, что характер изменения силового поля подложки по мере удаления от

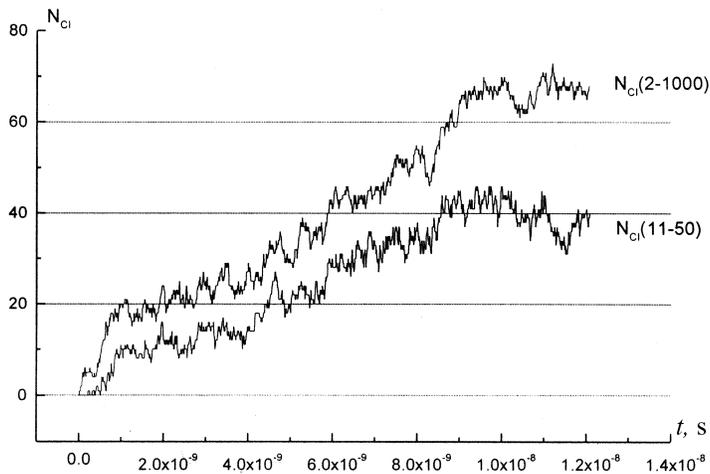


Рис. 2. Изменение числа кластеров в пограничном слое.

поверхности кристаллизации будет экспоненциальным. В связи с этим для определения вероятностей были введены следующие выражения:

$$W_A = W_{A0} \exp\left(-\frac{E_A}{kT}\right) \left(2 \exp\left(\frac{z}{\delta} \ln(0.5)\right) - 1\right), \quad (1)$$

$$W_D = W_{D0} \exp\left(-\frac{E_D}{kT}\right) \left(\exp\left(\frac{z}{\delta} \ln(2)\right) - 1\right), \quad (2)$$

где E_A и E_D — характерные значения энергии ассоциации и распада кластера, W_{A0} , W_{D0} — коэффициенты нормировки, z — нормальная компонента координаты.

Фазовые траектории образующихся кластеров определялись, используя стандартные процедуры метода молекулярной динамики. Для атомов расплава, ввиду статистической независимости их движения, динамика изменения фазовых траекторий не отслеживалась. Их координаты задавались на каждом шаге интегрирования псевдослучайным образом в некоторой сфере радиусом несколько σ , вокруг каждого кластера [2].

Были проведены предварительные расчеты по модели. На рис. 2 представлено изменение суммарного числа кластеров $N_{cl}(2-1000)$ с

числом частиц от 2 до 1000 и кластеров $N_{Cl}(11-50)$ с числом частиц от 11 до 50. Из рисунка видно, что количество кластеров достигает максимального значения за время 10^{-8} s и далее флуктуирует около этой величины.

При расчете определялось среднее значение компонент скорости образующихся кластеров. Для v_x и v_y компонент скорости кластеров средние значения, как показал расчет, были близки к нулю. Для v_z компоненты скорости, нормальной к поверхности подложки, получено среднее значение $v_z = 10^{-1}$ m/s. Это значение на 2 ÷ 3 порядка ниже величины среднеквадратичной скорости теплового движения. Таким образом, в системе наблюдается дрейф кластеров от подложки в объем расплава, причем чем массивнее кластер, тем выше скорость дрейфа. В принципе может реализоваться два варианта: если плотность образующихся кластеров больше плотности расплава, то под действием поля кластеры будут дрейфовать к поверхности роста, скорость осаждения в этом случае будет выше, а структура образующегося монокристалла будет менее совершенной, если же плотность образующихся кластеров меньше плотности расплава, то под действием поля кластеры будут дрейфовать от поверхности роста, в качестве единиц роста будут преобладать кластеры с малым числом частиц либо атомы, скорость осаждения в этом случае будет низкой, а структура растущего монокристалла будет более совершенной.

Таким образом, за счет наличия этого явления возможно создать такие условия, при которых рост монокристалла будет происходить в основном за счет атомов или малоатомных кластеров, что, очевидно, должно приводить в последнем случае к структурно более совершенным слоям.

Работа выполнена при финансовой поддержке в виде гранта Т00-5.4-2927 Министерства образования РФ по фундаментальным исследованиям в области технических наук по направлению „Металлургия полупроводников“.

Список литературы

- [1] Дистлер Г.И., Каневский В.М., Герасимов Д.М. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1984. Т. 48. № 9. С. 1698–1702.
- [2] Lyutikov A.R., Khukhryansky Yu.P. // Fourth International Conference Single Crystal Growth, Strength Problems, and Heat Mass Transfer, Proceedings. Obninsk, 2001. P. 1059–1064.