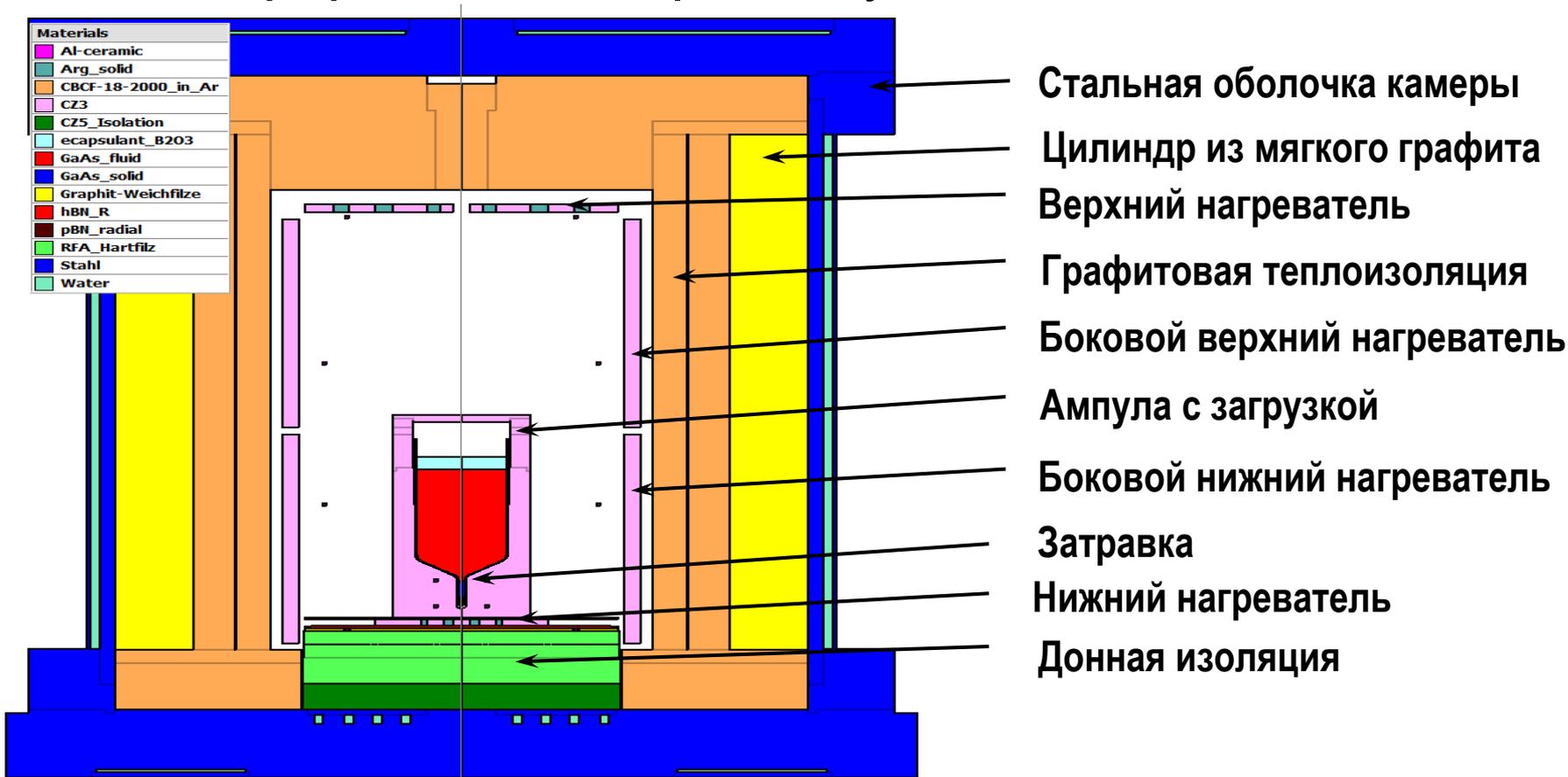


Процесс роста легированных Si монокристаллов GaAs методом Vertical Gradient Freeze (VGF) и его оптимизация с помощью компьютерного моделирования в CGSim

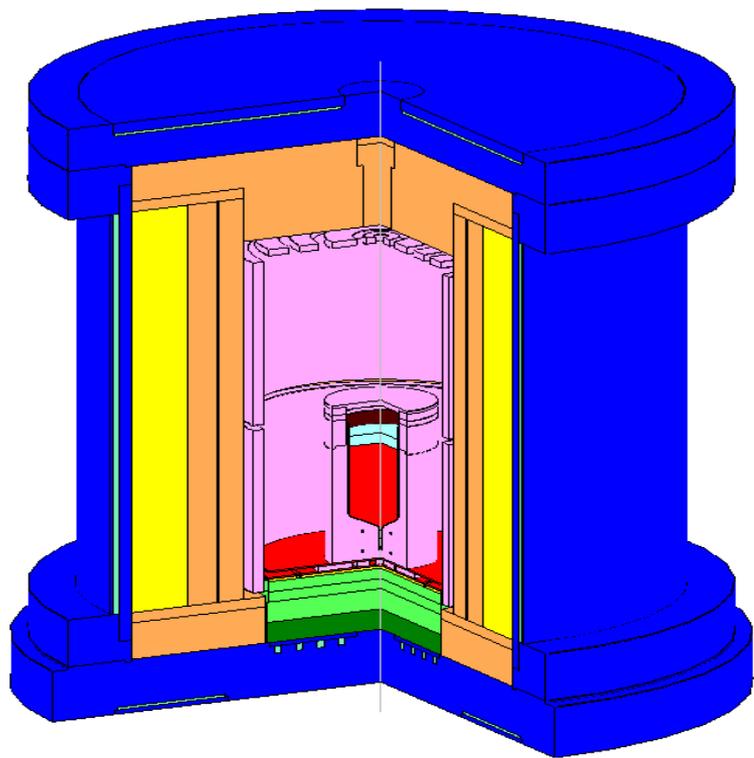
Панов А.С.^{1,3}, *Микаелян Г.Т.*^{2,3}, *Таривердиев С.*^{2,3}

1. ИАТЭ НИЯУ МИФИ, г. Обнинск
2. НИЯУ МИФИ, г. Москва
3. ООО "LASSARD", г. Обнинск
e-mail: panovas20@oiate.ru

Совместно с компанией ООО «Софт-Импакт» была разработана модель ростовой установки Kronos 40



Параметры процесса роста



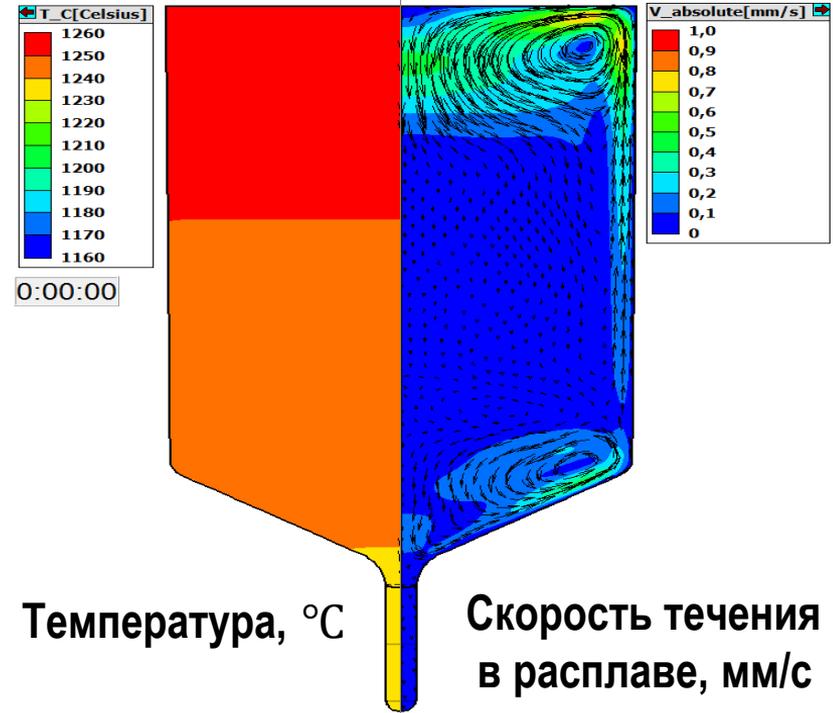
3D вид

Диаметр кристалла	104.5 мм
Длина кристалла (цилиндр)	134.5 мм
Скорость роста цилиндрической части	1.5-2 мм/ч
Масса загрузки	7 кг
Толщина слоя флюса V_2O_5	20 мм
Количество нагревателей	4
Управление нагревателями	независимое управление нагревателями по контрольным значениям температуры в термопарах около нагревателей

Тепло и массоперенос в системе кристалл/расплав

Анимация

- ▶ Черная сплошная линия соответствует положению фронта кристаллизации с температурой $T=1238^{\circ}\text{C}$.
- ▶ Форма фронта кристаллизации меняется от плоской на нижнем конусе к вогнутой в направлении кристалла для цилиндрической части.
- ▶ Течение в расплаве определяется свободно конвективным течением с преобладающим вихрем около фронта кристаллизации, влияющим на форму фронта кристаллизации и вихрем у поверхности расплав/флюс с значениями скорости до 1 мм/с.
- ▶ Был получен рецепт роста, характеризующийся небольшой скоростью роста на нижнем конусе в пределах 0.5 мм/час с увеличением скорости на цилиндре до 2 мм/ч и постепенным снижением к концу процесса.



Модель плотности дислокаций

Alexander-Haasen модель

$$\varepsilon = \varepsilon^e + \varepsilon^T + \varepsilon^c$$

$\varepsilon, \varepsilon^e, \varepsilon^T, \varepsilon^c$ суммарная, эластичная,
Термическая, пластичная деформации

$$\varepsilon^T = \beta \times (T - T_{ref})$$

$$\sigma = c \times \varepsilon^e \text{ - закон Гука}$$

$$\frac{d\varepsilon^c}{dt} = b \times v \times N_m$$

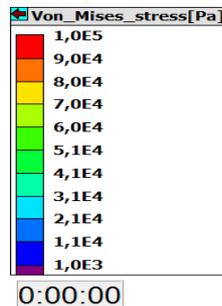
$$\tau_{eff} = \sqrt{J_2} - R \times \frac{E \times b}{4 \times \pi \times (1 - \nu^2)} \times \sqrt{N_m}$$

$$v = k_0 \times \tau_{eff}^p \times \exp\left(-\frac{Q}{k \times T}\right)$$

v - средняя скорость движения дислокаций

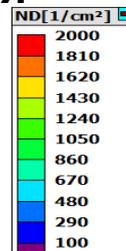
$$\dot{N}_m = K \times k_0 \times \tau_{eff}^{p+1} \times \exp\left(-\frac{Q}{k \times T}\right) \times N_m$$

\dot{N}_m - скорость умножения плотности дислокаций



Остаточные
напряжения

Анимация



Плотность
дислокаций



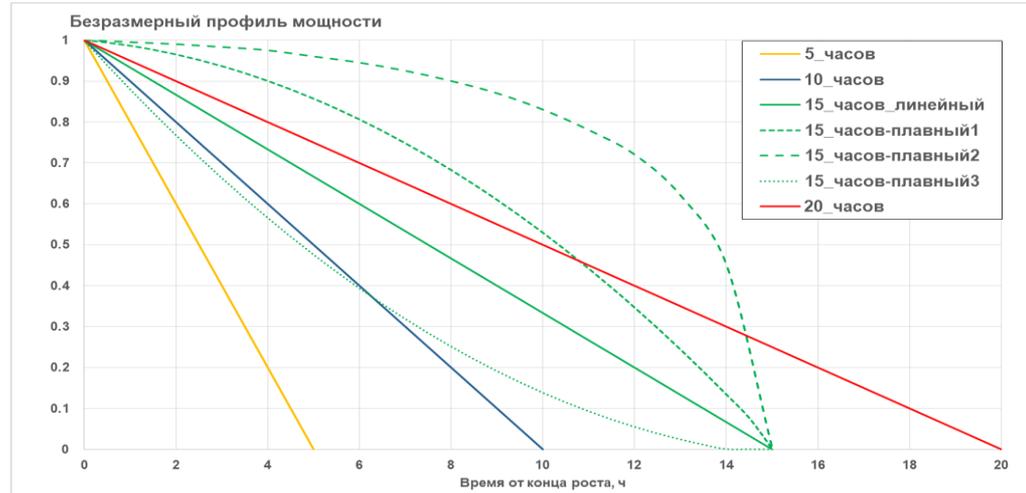
Стадия отжига и охлаждения

Плотность дислокаций в кристаллах GaAs может дополнительно увеличиться в процессе отжига и охлаждения, поэтому важно подобрать такой режим охлаждения, по результатам которого плотность дислокаций увеличится незначительно.

Было проанализировано около 10 различных режимов отжига с охлаждением.

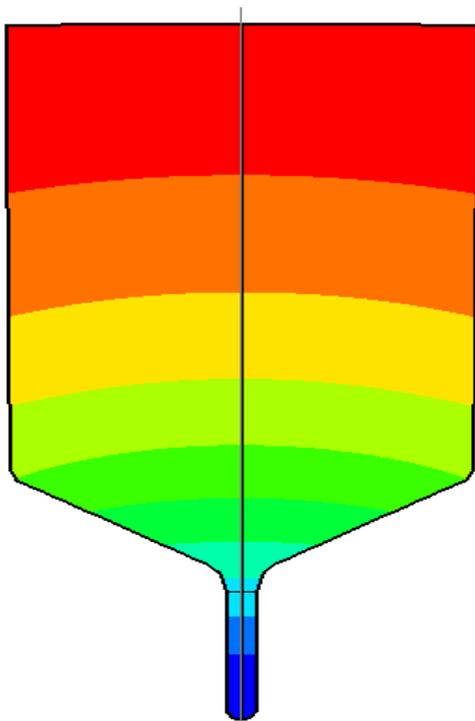
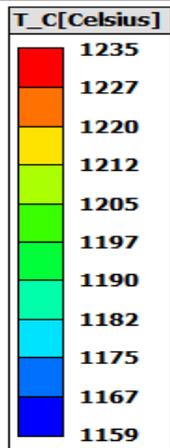
Для варианта 15 часов были дополнительно рассчитаны 3 режима охлаждения с нелинейным изменением мощности.

Выбор режима охлаждения основывался на расчётной плотности дислокаций.



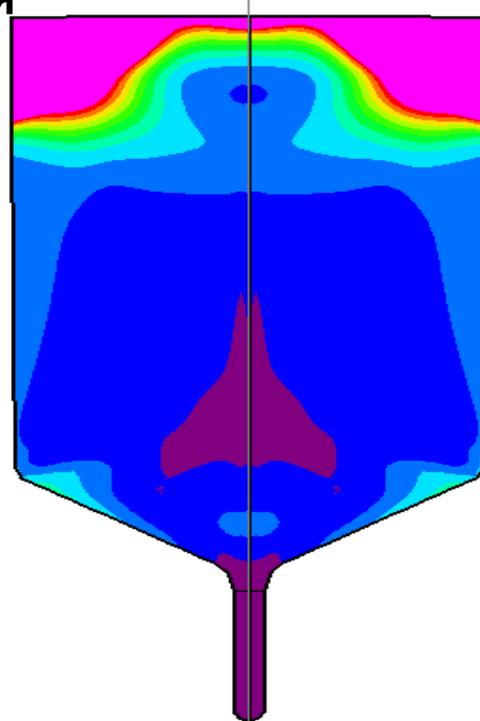
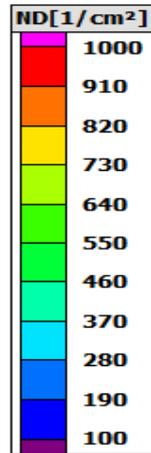
Анимация температуры и плотности дислокаций на этапе охлаждения

150:00:00



Распределение
температуры

150:00:00



Распределение
плотности дислокаций

Расчётный рецепт роста был перенесён на реальную ростовую установку Kronos 40. При проведении экспериментов была сделана определённая поправка заданных температур на нагревателях на некоторую величину. В ходе работы получены монокристаллические слитки GaAs легированного Si со следующими параметрами (указаны средние значения):

Плотность дислокаций	$<250 \text{ см}^{-2}$
Концентрация носителей заряда	$1,45 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$
Подвижность носителей заряда	$2,08 \cdot 10^3 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$