МОДЕЛИРОВАНИЕ РОСТА МИКРОВКЛЮЧЕНИЙ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ НИКЕЛЯ В МОНОКРИСТАЛЛАХ КРЕМНИЯ

Н.А.ТУРГУНОВ

Мақолада кремний монокристалларида киришмали никель атомлари микробирикмаларининг ўсишини моделлаштириш масаласи ёритилган.

In this article was described the problems of modeling development microstructure of nickel atoms in silicon mono-crystal.

Известно [1-3], что в зависимости от температуры и времени диффузии, а также от скорости охлаждения образцов после диффузии, образующиеся в объеме монокристаллов кремния преципитаты могут иметь различные размеры и геометрические формы. В работах [4,5] нами были проведены исследования по изучению размеров, структуры и формы примесных преципитатов никеля в монокристаллах кремния при различных условиях диффузии. Выявлено, что в диффузионно легированных образцах Si<Ni> наблюдаются примесные преципитаты с различными размерами и формами. Результаты экспериментальных исследований показали, что значение скорости охлаждения ($v_{охл}$) образцов после диффузии играет особую роль в процессе преципитации.

В данной работе предлагается модель для описания кинетики роста размеров пластинчатых, октаэдрических и сферических преципитатов никеля в кремнии.

В работе [2] предложена теоретическая модель преципитации точечных дефектов в кристаллах. Было показано, что кинетику преципитации точечных дефектов в полупроводниках можно описать с помощью дифференциального уравнения:

$$\frac{dN(t)}{dt} = k_0 N_c^{1-\alpha}\left[N(t) - N_e\right]\left[N(0) + mN_c - N(t)\right]^{\alpha} \quad (1)$$

где $N(t)$ – концентрация межузельного никеля, несвязанного в преципитаты; N_c – концентрация центров зарождения преципитатов; N_e – равновесная концентрация межузельного никеля в кремнии; m – число атомов никеля в центре зарождения, k_0 – кинетический коэффициент, связанный с коэффициентов диффузии межузельного никеля D следующим образом: $k_0 = 4\pi Da$, где a=3.5 Å, и может быть вычислен из плотности фазы Ni_3Si.. Параметр α отвечает за геометрию преципитатов (для сферических преципитатов $\alpha \approx 1$ [3]).

Асимптотики уравнения (1) при больших и малых временах согласуются с теорией Хэма [4] и имеют следующий вид:

$$\frac{N(t) - N_e}{N(0) - N_e} = \exp\left\{-N_c\left\{(1-\alpha)\left[N(0) - N_e\right]^{\alpha} k_0 t\right\}^{\frac{1}{1-\alpha}}\right\} \quad (2)$$

$$N(t) - N_e = A\exp\left\{-N_c^{1-\alpha}\left[N(0) + mN_c - N_e\right]^{\alpha} k_0 t\right\} \quad (3)$$

Среднее число атомов никеля в преципитатах $n(t)$ находится из закона сохранения числа атомов никеля в кремнии:

$$n(t) = \frac{N(0) - N(t)}{N_c} \quad (4)$$

Средний геометрический размер преципитатов *R(t)* и число частиц в преципитатах *n(t)* на начальной стадии преципитации описываются следующими асимптотическими выражениями [3]:

$$R(t) \propto t^{\frac{\alpha}{1-\alpha}}, \; n(t) \propto t^{\frac{1}{1-\alpha}} \quad (5)$$

При рассмотрении пластинчатого преципитата с квадратным основанием со стороной *l* и толщиной *d* можно считать, что при росте преципитата сохраняется постоянной величина $\gamma = d/l$. Объем преципитата определяется следующим выражением:

$$V = l^2 d = \gamma l^3 \quad (6)$$

С другой стороны выражение определяющее объем преципитата никеля, занимаемый в решетке кремния состоящий из *n* молекул силицида $NiSi_3$, можно записать в следующем виде:

$$V = nu \quad (7)$$

где *u* — объем, занимаемый одной молекулой силицида $NiSi_3$ в кристаллической решетке кремния.

Объединение формул (6) и (7) позволяет найти зависимость параметров *l* и *d* от времени в процессе роста пластинчатого преципитата с постоянным эксцентриситетом:

$$l(t) = \left(\frac{\upsilon n(t)}{\gamma} \right)^{1/3} \quad (8)$$

$$d(t) = \left[\upsilon \gamma^2 n(t) \right]^{1/3} \quad (9)$$

Объем преципитата, имеющего форму октаэдра со стороной грани *l*, можно записать следующим образом:

$$V = \frac{\sqrt{2}}{3} l^3 \quad (10)$$

Приравнивая выражения (7) и (10), можно получить зависимость размера стороны *l* растущего преципитата от времени:

$$l(t) = \left(\upsilon \frac{3n(t)}{\sqrt{2}} \right)^{1/3} \quad (11)$$

Если использовать идеализированное понятие о сферических преципитатах, то аналогично выражениям (8) и (11) можно получить следующее соотношение для среднего радиуса преципитатов:

$$R(t) = \left(\upsilon \frac{3n(t)}{4\pi} \right)^{1/3} \quad (12)$$

Таким образом, решая уравнение (1) и определяя временную зависимость среднего числа частиц в преципитате с помощью выражения (4), можно получить значения среднего геометрического размера пластинчатых (8),(9), октаэдрических (11) или сферических преципитатов в любой момент времени *t*.

Литература:

1. Zainabidinov S.Z., Turaev A.R., Karimberdiev Kh.Kh., Kholbekov A. Turkish Journal of Physics, 2, 129 (1994).
2. Булярский С.В., Светухин В.В., Приходько О.В. ФТП, 33, 1281 (1999).
3. Зайнобидинов С.З., Фистуль В.И., Тураев А.Р. и др. ФТП, 23. Вып.12, 2118 (1989).
4. Тургунов Н.А. Доклады Академии Наук Высшей школы России. Новосибирск. 9, №2, 70 (2007).
5. Зайнабидинов С.З., Тургунов Н.А. УФЖ, 1, №4, 334 (1999).

ЎзР ИИВ академияси,
2011 йил 7 октябрда қабул қилинган
(Тақризчи: проф. С.З.Зайнобидинов)