

УДК 621.315.592:536.24

## МЕХАНИКА ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ ПРИ РОСТЕ И ТЕРМООБРАБОТКЕ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ

© 2011 г.

А.И. Простомолотов<sup>1</sup>, Ю.Б. Васильев<sup>2</sup>, А.Н. Петлицкий<sup>2</sup><sup>1</sup>Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва<sup>2</sup>НПО «Интеграл», Минск (Беларусь)

prostom@ipmnet.ru

Поступила в редакцию 15.06.2011

Рассмотрена проблема дефектообразования в бездислокационных монокристаллах кремния при их росте и термообработке. Для ее решения применяется сопряженная математическая модель, позволяющая оптимизировать тепловое поле в современных промышленных установках выращивания монокристаллов кремния по методу Чохральского с целью управления термонапряженным состоянием и дефектообразованием как в растущих монокристаллах кремния, так и при термообработках пластин, изготавливаемых на их основе. Разработаны и верифицированы по экспериментальным данным методы расчета рекомбинации собственных точечных дефектов и формирования микродефектов (микропор и оксидных частиц) в твердом растворе кислорода кристаллизующегося (термообрабатываемого) монокристаллического кремния. Исследование выполнено на основе интегрированной математической модели при использовании комплекса программ Crystmo/Marc.

*Ключевые слова:* моделирование, выращивание кристаллов, кремний, термообработка, микродефекты.

### 1. Модели дефектообразования при росте монокристаллов кремния

Актуальной проблемой механики является изучение закономерностей образования микродефектов в бездислокационных монокристаллах кремния большого диаметра как на стадии их выращивания, так и при последующих термообработках вырезаемых из них пластин. Это требует детального изучения сопряженных теплофизических процессов в тепловых узлах промышленных ростовых установок. С учетом тепловой истории и напряженного состояния монокристалла рассчитываются процессы переноса и рекомбинации собственных точечных дефектов и их последующая агломерация в микродефекты. На рис. 1 показана математическая модель роста бездислокационных монокристаллов кремния большого диаметра (200 мм) по методу Чохральского, который заключается в вытягивании со скоростью  $V$  кристалла 1 из расплава 2, содержащегося в тигле 3. Тепловые условия роста кристалла создаются таким образом, что положение фронта кристаллизации (ФК) 4 сохраняется, а убыль расплава в тигле компенсируется его поднятием. На форму ФК и тепловое поле в растущем кристалле существенное влияние оказывает наличие теплового экрана 5, показанного справа от оси, что видно из сравнения с аналогичной картиной изо-

терм без теплового экрана (слева от оси).

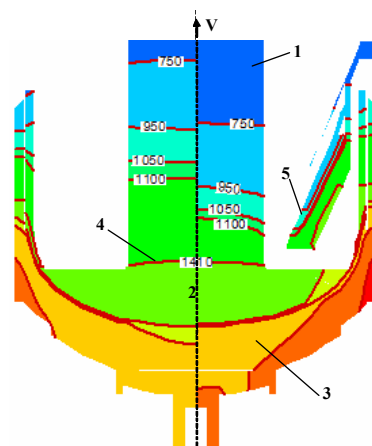


Рис. 1

На этом рисунке изотермами (°C, сплошные линии) выделены важные температурные зоны, отвечающие различным моделям дефектообразования при росте бездислокационных монокристаллов кремния. В зоне, прилегающей к ФК – 1410 °C, происходит рекомбинация собственных точечных дефектов (вакансий и межузельных атомов кремния). В более холодной зоне (1100–1050 °C) происходит образование первичных микродефектов (кластеров остаточных точечных дефектов) – микропор и кластеров межузельных атомов кремния, а также происходит взаимодействие

межузельного кислорода с вакансиями с образованием оксидных частиц. Далее, по мере понижения температуры, в температурных зонах 950–750 °С и 750–450 °С происходит процесс, связанный с распадом пересыщенного твердого раствора кислорода в кремнии. Для управления процессами дефектообразования важно регулировать тепловые условия как непосредственно вблизи ФК, так и на удалении от него, где образуются дефекты кислород-вакансионной природы. Для решения данной проблемы разработан целый ряд моделей механики дефектообразования, которые применяются в сопряжении с тепловой моделью процесса роста кристалла методом Чохральского [1, 2], что позволяет прогнозировать тип, плотность и размеры микродефектов в применении к конкретным тепловым узлам и процессам роста монокристаллического кремния.

## 2. Модели дефектообразования при термообработке пластин кремния

После выращивания монокристаллического бездислокационного слитка кремния его нарезают на тонкие диски – пластины. Например, для слитка диаметром 200 мм толщина пластины не превышает 1 мм. До начала изготовления интегральной схемы на основе такой пластины ее подвергают комбинированным (длительным и быстрым) термообработкам для уменьшения и даже полного исключения микродефектов, образовавшихся в период выращивания кристалла. В данной работе такие термообработки пластин кремния были выполнены в НПО «Интеграл» (Беларусь). В том числе, быстрый термический отжиг (БТО) для создания бездефектного приповерхностного рабочего слоя с помощью кратковременного (30 с) нагрева проведен на установке «AG HeatPulse 8108». Плотность и морфология микродефектов были исследованы с целью определения возможности создания бездефектного слоя в пластине кремния. Известно, что применение БТО сопровождается появлением больших локальных напряжений в окрестности опор горизонтального крепления пластины кремния (рис. 2), что может приводить к появлению и дальнейшему распространению дислокаций по плоскостям скольжения в монокристаллическом кремнии. Это, в конечном счете, может вызвать невозвратное повреждение пластины. Поэтому было исследовано трехмерное напряженное состояние в пластинах кремния большого диаметра ( $R = 100$  мм – радиус,  $H = 1$  мм – толщина пластины,  $L = 0.6R$  – расстояние между опорами и центром пластины) с использованием модели [3] и

определены способы оптимального крепления пластины на 3-х и 4-х игольчатых опорах.

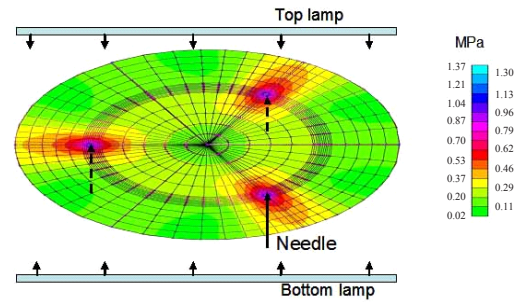


Рис. 2

Для описания дефектообразования применяется математическая модель, учитывающая диффузию и рекомбинацию вакансий и междузельных атомов кремния, а также образование вакансионных кластеров, как возможных центров кислородной преципитации [4]. Расчетные результаты по плотности распределения микродефектов были верифицированы для тестовых образцов по экспериментальным данным, полученным методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Детальные ПЭМ – исследования распределений микродефектов и их морфологии были выполнены для ряда серий экспериментальных пластин кремния подвергнутых термической обработке в следующих режимах: 1) 1100 °С / 0.5 – 8 ч; 2) 1100 °С / 0.5 – 8 ч + 700 °С / 24 ч; 3) 1150 °С / 30 с; 4) 1150 °С / 30 с + 700 °С / 24 ч. Типовой пример распределения микродефектов вблизи поверхности пластины с образованием бездефектного приповерхностного черного слоя показан на рис. 3 для следующего термического режима: 1100 °С / 8 ч. В этом случае суммарная плотность микродефектов в пластине составила  $7.1 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$ .

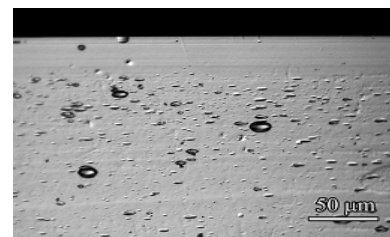


Рис. 3

Соавтор – Н.А. Везуб (ИПМех РАН, Москва).

Поддержано РФФИ, проект №10-02-90004-Бел\_а.

### Список литературы

1. Простомолотов А.И. // Сложные системы и процессы. 2009. №2. С. 66–77.

2. Prostromolotov A.I. // Phys. Stat. Sol. 2009. V. 6, Eng. 2005. V. 1, No 2. P. 61–71.  
No 8. P. 1874–1877. 4. Prostromolotov A.I., Verezub N.A. // Phys. Stat. Sol.  
3. Mezhenyi M.V. et al. // Int. J. Comp. Civil and Str. 2009. V. 6, No 8. P. 1878–1881.

**MECHANICS OF DEFECT FORMATION DURING THE GROWTH AND  
THERMAL ANNEALING OF MONOCRYSTALLINE SILICON**

*A.I. Prostromolotov, Yu.B. Vasiliev, A.N. Pyatlitski*

The problem of defect formation in dislocation-free silicon single crystals during their growth and thermal annealing is presented. To solve it, the conjugate mathematical model is applied which includes possibilities of the thermal optimization for modern industrial furnaces of Czochralski silicon crystal growth, the control of thermal stress state and the defect formation during silicon ingot growth and thermal annealing of cutted wafers. Calculation methods for intrinsic point defect interaction and microdefect formation (microvoids and oxide particles) in solid oxygen solution of crystallized monocrystalline silicon have been developed and verified by experimental data. The study was carried out on the basis of an integrated mathematical model of Crystmo/Marc software code.

*Keywords:* modeling, crystal growth, silicon, thermal annealing, microdefects.