

УДК 538.911; 539.21

Расчет влияния условий роста на коэффициент распределения примесных атомов между расплавом и растущим кристаллом

В.М. Ленченко, Ю.Ю. Логинов*

Сибирский федеральный университет,
Россия 660041, Красноярск, пр. Свободный, 79¹

Received 16.09.2009, received in revised form 06.10.2009, accepted 20.10.2009

Потоки примесных атомов (ПА) на каждом из участков $0 \leq x \leq l$ системы расплав-растущий кристалл представлены в виде выражения $j \approx aC(0) - bC(l)$, в котором a и b определены через скорости переноса ПА (конвективную – v_c , дрейфовую – v_d и термодиффузионную – v_θ) соответственно в расплаве – (a_l, b_l) , в кристалле – (a_s, b_s) , а также на границе раздела фаз – (a_{sl}, b_{sl}) . Из условия квазистационарности процесса роста $j_l = j_{ls} = j_s$ найдены коэффициенты распределения концентраций ПА на каждом из участков $K_l = \frac{C_l(0)}{C_l}$, $K_{ls} = \frac{C_s(0)}{C_l(0)}$, $K_s = \frac{C_s(d_s)}{C_s(0)}$ и определен общий коэффициент распределения ПА между объемом расплава и охлаждаемой частью растущего слитка $K = \frac{C_s}{C_l}$. Полученное выражение для K позволяет анализировать влияние режимов роста (скорости вытягивания слитка – v_c , градиента температур (через v_θ) и силовых полей (через v_d) на перенос и накопление ПА в растущем кристалле.

Ключевые слова: примесные атомы, расплав, кристалл, условия роста.

1. О процессах переноса частиц в системе расплав – растущий кристалл

При выращивании кристалла из расплава по методу Чохральского используются максимально возможные градиенты температур на фронте кристаллизации, а вытягивание слитка по мере его роста создает у границы раздела фаз упругие напряжения [1, 2]. В таком термоупругом поле осуществляется диффузионно-дрейфовый перенос примесных атомов (ПА) и вакансий из расплава (l -фазы) в кристалл (s -фазы). При этом особую роль играет фильтрационный эффект на l/s -границе отгеснения ПА с $K_{ls} < 1$ в глубь расплава и экстракции тех из них, у которых $K_{ls} > 1$, где коэффициент фильтрации K_{ls} известен как коэффициент распределения ПА на границе раздела фаз:

$$K_{ls} = \frac{C_s(0)}{C_l(0)}. \quad (1.1)$$

Здесь $C_s(0)$ и $C_l(0)$ – концентрации ПА соответственно в s - и l -фазах.

* Corresponding author E-mail address: loginov@sibsau.ru

¹ © Siberian Federal University. All rights reserved

Расчет распределения $C_s(x)$ и $C_l(x)$ у l/s -границы в зависимости от режимов роста кристалла (градиентов температур, скорости вытягивания слитка v_c и т.д.) является необходимым этапом в определении эффективного коэффициента распределения ПА в l/s системе

$$K_{ls} = \frac{C_s(d_s)}{C_l(-d_l)}, \quad (1.2)$$

где $C_s(d_s)$ и $C_l(-d_l)$ – входная (в объеме расплава) и выходная (в объеме слитка) концентрации частиц на расстояниях d_s и d_l от l/s -границы. При этом $C_l(-d_l)$ задается примесным составом расплава, а $C_s(0)$, $C_l(0)$ и $C_s(d_s)$ должны быть рассчитаны с помощью уравнений переноса частиц. Одновременно с этим должны быть определены и протяженности d_s и d_l активных зон в расплаве и кристалле, в которых и происходит перераспределение частиц в обе стороны от l/s -границы.

На основе гидродинамики расплава под вращающимся диском было показано, что d_l зависит от угловой скорости вращения ω , кинематической вязкости расплава η и коэффициента диффузии частиц D_l по формуле

$$d_l \approx 1,6 \cdot D_l^{\frac{1}{6}} \cdot \eta^{\frac{1}{3}} \cdot \omega^{-\frac{1}{2}}. \quad (1.3)$$

При этом считалось, что движение расплава является ламинарным с нормальной составляющей скорости у входа в d_l -зону:

$$v_l = \frac{2D_l}{d_l}. \quad (1.4)$$

В кристалле же активной зоной следует считать высокотемпературный участок $0 < x < d_s$ с $T_0 < T < T_s \equiv T(d_s)$, прилегающий к расплаву $T(0) = T_0$, в котором дрейфовая скорость частиц v_d сопоставима со скоростью конвективного переноса среды v_c , равной скорости роста кристалла. С точностью до фактора $f (> 0,01)$ в d_s -зоне это условие запишем в виде

$$v_d > f v_c. \quad (1.5)$$

Определив температурный интервал $\Delta T = T_0 - T_s$, в котором это условие выполняется, можно оценить протяженность d_s -зоны по формуле

$$d_s = \frac{\Delta T}{G}, \quad (1.6)$$

где $G = \frac{dT}{dx}$ – градиент температур. Для этого необходимо знать зависимость v_d от T . Известна следующая связь между силой, действующей на частицу, и v_d :

$$v_d = uF = u(F_x + F_\theta) = v_x + v_\theta. \quad (1.7)$$

Здесь $u = \frac{D}{\theta}$ – подвижность частиц, D – их коэффициент диффузии, $\theta = \kappa T$, $F_x = -\frac{\partial \varepsilon}{\partial x}$ – обычная сила (например, упругих напряжений, электрического поля), $F_\theta = -\alpha G$ – термодиффузионная сила, α – коэффициент. Величина $\alpha T = \varepsilon_m$ может быть отождествлена с энергией миграции в коэффициенте диффузии

$$D = D_0 e^{-\frac{\varepsilon_m}{\theta}}. \quad (1.8)$$

Однако из-за слабой зависимости D_0 от T в кристалле добавкой к α , связанной с D_0 , можно пренебречь. В этом приближении

$$v_\theta = uF_\theta = G \cdot \frac{\partial D}{\partial T} = \frac{D \varepsilon_m}{\theta} \cdot \frac{G}{T}. \quad (1.9)$$

Проведем оценки выполнения условия (1,5) для типичного режима роста кристалла кремния методом Чохральского [1].

Пренебрегая силовыми полями ($F_x \ll F_\theta$) и учитывая, что в горячей зоне $T > 10^3$ К, $G > 50$ К/см и что $\varepsilon_m \approx 1-2$ эВ, находим, что условие (1,5) выполняется, если $D > 10^{-5}-10^{-4}$ см²/с и, согласно (1,6), $d_s \approx 1-10$ см. Вакансии, междоузельные атомы и ПА с малыми ионными радиусами могут обладать такими большими коэффициентами диффузии и d_s . В то же время для ПА с малыми $D < 10^{-5}$ см²/с при обычных режимах роста должно быть $v_d \ll v_c$, и их перенос в кристалле будет определяться только конвективным путем со скоростью вытягивания слитка из расплава v_c .

В расплаве подвижность ПА на порядок выше, чем в кристалле, и поэтому протяженность диффузионной зоны d_l будет лимитироваться в основном гидродинамикой (уравнением (1.3)).

Из изложенного следует, что для расчета эффективного коэффициента распределения ПА в системе расплав-растущий кристалл необходимо учитывать и конвективный, и диффузионно-дрейфовый процесс переноса ПА не только в расплаве, но и в кристалле (как в [3] для собственных точечных дефектов), а также на l/s -границе. Это значит, что этот коэффициент, согласно (1.1) и (1.2), должен быть представлен в виде

$$K = K_l \cdot K_{ls} \cdot K_s. \quad (1.10)$$

Здесь

$$K_l = \frac{C_l(0)}{C_l(-d_l)}, \quad K_s = \frac{C_s(d_s)}{C_s(0)} \quad (1.11)$$

– это коэффициенты распределения ПА, определяемые, соответственно, процессами переноса в d_l -зоне (K_l) и в d_s -зоне (K_s).

2. Исходные уравнения переноса

В конденсированных средах перенос частиц (в нашем случае – примесных атомов, вакансий и междоузельных атомов) происходит путем их перескока из одного квазиравновесного состояния в соседнее, разделенных средней длиной перескока λ и энергией активационного барьера ε_m . Частота перескоков ν определяется выражением

$$\nu = \nu_0 e^{-\frac{\varepsilon_m}{\theta}}, \quad (2.1)$$

где ε_m – энергия миграции; ν_0 – энтропийный фактор.

При наличии силовых полей (упругих, электрических, термодинамических) частоты перескоков по полю ν и против μ отличаются на фактор

$$\Gamma = \frac{\mu}{\nu} = e^{-\Delta}, \quad (2.2)$$

в котором

$$\Delta = \frac{F\lambda}{\theta}, \quad (2.3)$$

где $\Delta\varepsilon_m = \lambda F$ – изменение высоты активационного барьера под действием силы F , вызывающей направленное перемещение частиц в среде со скоростью, которая определяется уравнением (1.7)

$$\nu_d = uF. \quad (2.4)$$

С учетом (2.4) выражение (2.3) переписывается еще в таком виде:

$$\Delta = \frac{\nu_d \lambda}{D}. \quad (2.5)$$

В конвективной среде, как будет показано далее, это выражение обобщается заменой ν_d на $\nu = \nu_c + \nu_d$, где ν_c – скорость конвекционного переноса (в нашем случае ν_c – это скорость вытягивания слитка из расплава, равная скорости роста кристалла). Для слитков большого диаметра, выращиваемых по методу Чохральского, можно ограничиться анализом переноса частиц в одномерном приближении, пренебрегая боковыми эффектами. Введем нумерацию атомных плоскостей, параллельных l/s -границе, индексом r , так, что c_r, ν_r, μ_r, ν_r и т.д. – это параметры уравнений переноса с координатой $x_r = r\lambda$, где λ – межплоскостное расстояние (в расплаве – это среднее межатомное расстояние). Для простоты будем считать, что каждая из атомных плоскостей образует энергетический барьер, поток частиц через который в перескоковой модели может быть описан следующим выражением:

$$j_r = \lambda(\nu_r C_r - \mu_{r+1} C_{r+1}). \quad (2.6)$$

Здесь C_r и C_{r+1} – концентрации частиц в двух смежных межплоскостных состояниях; ν_r и μ_{r+1} – частоты перескоков вперед и обратно через r -й атомный слой. Соответственно, уравнение кинетики накопления частиц в r -м состоянии приобретает вид

$$\frac{\partial C_r}{\partial t} = j_{r-1} - j_r. \quad (2.7)$$

С учетом (2.6) и (2.2) в обозначениях

$$V_r = \lambda \nu_r C_r, \quad \Gamma_r = \frac{\mu_r}{\nu_r}, \quad (2.8)$$

уравнения (2.6) и (2.7) перепишутся в более компактной форме:

$$j_r = V_r - \Gamma_{r+1} V_{r+1} \quad (2.9)$$

и

$$\frac{\partial C_r}{\partial t} = (Y_{r-1} - \Gamma_r Y_r) - (Y_r - \Gamma_{r+1} Y_{r+1}). \quad (2.10)$$

В приближении для сплошной среды заменой

$$Y_{r+1} \rightarrow Y + \lambda Y' + \frac{1}{2} \lambda^2 Y''$$

$$Y_{r-1} \rightarrow Y - \lambda Y' + \frac{1}{2} \lambda^2 Y''.$$

уравнения (2.9) и (2.10) превращаются в их дифференциальные аналоги

$$j = v_d C - \frac{\partial}{\partial x}(CD) \quad (2.11)$$

и

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x}. \quad (2.12)$$

При этом для дрейфовой скорости v_d и коэффициента диффузии D получаются следующие выражения:

$$D = \frac{1}{2}(v + \mu)\lambda^2, \quad v_d = (v - \mu)\lambda. \quad (2.13)$$

Перепишем уравнение (2.11) еще в таком виде:

$$j = vC - \frac{\partial}{\partial x}(CD). \quad (2.14)$$

Здесь v – суммарная скорость переноса частиц

$$v = v_d + v_\theta, \quad (2.15)$$

где v_θ находят из уравнения

$$Cv_\theta = -\frac{\partial}{\partial T}(CD)G, \quad (2.16)$$

которое представляет собой термодиффузионную составляющую потока, определяемую градиентом температур $G = \frac{\partial T}{\partial x}$ и явной зависимостью C и D от температуры.

Введем термодиффузионную силу (ТДС) по формуле

$$F_\theta = -\alpha G, \quad (2.17)$$

где α – коэффициент ТДС. Тогда, замечая, что

$$v_\theta = uF_\theta = \frac{1}{\theta} DF_\theta,$$

получим для α следующее выражение:

$$\alpha = \theta \frac{\partial}{\partial T} \ln(CD). \quad (2.18)$$

3. Интегральная форма уравнений переноса

Поток частиц через однородный участок среды при наличии градиента температур G и силовых полей F можно выразить через концентрации частиц $C(0)$ и $C(l)$ на границах участка $0 \leq x \leq l$. Для этого проинтегрируем уравнение (2.11) при соответствующих граничных условиях. В результате получим

$$\int_0^l j(x) e^{-(\Delta_c + \Delta_d)} dx = D(0) [C(0) - C(l) e^{-\Delta(l)}] \quad (3.1)$$

здесь

$$\Delta = \Delta_d + \Delta_c + \Delta_\theta, \quad (3.2)$$

$$\Delta_c = \int_0^l \frac{v_c dx}{D}, \quad \Delta_d = \int_0^l \frac{F_d dx}{\theta}, \quad (3.3)$$

$$\Delta_\theta = \int_0^l \frac{v_\theta dx}{D} \quad v_d = u F_d. \quad (3.4)$$

При этом учтено, что

$$v_\theta = -\frac{\partial D}{\partial x}, \quad u_d = \frac{D}{\theta}. \quad (3.5)$$

Напомним, что v_c , v_d , v_θ , соответственно, конвективная, дрейфовая и термодиффузионная скорости переноса частиц, u_d – их подвижность, F_d – сила, вызывающая дрейф частиц.

В стационарном режиме роста кристалла поток частиц j независим от x , и поэтому из (3.1) следует

$$j = \frac{D(0)}{L} \cdot [C(0) - C(l) e^{-\Delta(l)}] \quad (3.6)$$

где

$$L = \int_0^l e^{-(\Delta_c + \Delta_d)} dx. \quad (3.7)$$

Для вычисления интегралов (3.3) – (3.7) требуется знание зависимости $T(x)$, $D(x)$ и $F(x)$ от координаты x . В однородном слитке, выращиваемом по методу Чохральского, поток тепла из расплава в охлаждаемую часть слитка постоянен, поэтому градиент температуры G не зависит (или слабо зависит) от x по крайней в d_x -зоне. Практически приемлемым можно считать приближение, в котором и F_d постоянно в пределах d_l - и d_s -зон. В таком случае интегралы (3.3) и (3.7) могут быть представлены в виде

$$\Delta = \frac{v}{v_\theta}, \quad v = v_\theta + v_d + v_c, \quad (3.8)$$

$$L = \frac{D(0)}{\nu} (1 - e^{-\Delta}). \quad (3.9)$$

Соответственно выражение для потока частиц (3.6) переписывается

$$j = aC(0) - bC(l), \quad (3.10)$$

где

$$b = ae^{-\Delta}, \quad (3.11)$$

$$a = \frac{D(0)}{L} = \nu [1 - e^{-\Delta}]^{-1}. \quad (3.12)$$

Замечая, что $a - b = \nu$, с учетом (3.6), (3.11) и (3.12), убеждаемся в справедливости (3.9) без вычисления интеграла (3.7).

4. Перенос частиц через неоднородные и сверхтонкие структуры

Описание эффектов переноса частиц через сверхтонкие структуры, состоящие из ограниченного числа атомных слоев (например, через окисные пленки на начальной стадии окисления), следует производить с помощью выражения для потока (2.9), которое мы перепишем в виде

$$j_r = Y_{r-1} - \Gamma_r Y_r. \quad (4.1)$$

Здесь введем обозначения

$$D_r = \lambda^2 \nu_r, \quad Y_r = C_r D_r, \quad \Gamma_r = \frac{\mu_r}{\nu_r} \equiv e^{-\Delta_r}. \quad (4.2)$$

В квазистационарном режиме переноса потоки частиц j_r во всех слоях ($r = 0, 1, 2, \dots, l-1$) одинаковы, поэтому

$$j = Y_0 - \Gamma_1 Y_1 = Y_1 - \Gamma_2 Y_2 = \dots = Y_{l-1} - \Gamma_l Y_l. \quad (4.3)$$

Таким образом получается система рекуррентных уравнений для определения распределения концентраций C_r по участку $0 < r < l$. Исключив с помощью этих уравнений промежуточные значения Y_r ($r = 1, 2, \dots, l-1$), последовательно находим

$$j = Y_0 - \Gamma_{01} Y_1 = \frac{Y_0 - \Gamma_{12} Y_2}{1 + \Gamma_{01}} = \frac{Y_0 - \Gamma_{13} Y_3}{1 + \Gamma_{01} + \Gamma_{02}} = \dots = \frac{Y_0 - \Gamma_{l1} Y_l}{1 + \Gamma_{01} + \Gamma_{02} + \Gamma_{03} + \dots + \Gamma_{0l-1}}. \quad (4.4)$$

Здесь

$$\Gamma_{0r} = \Gamma_1 \Gamma_2 \dots \Gamma_r = e^{-\Delta(r)}, \quad (4.5)$$

$$\Delta(r) = \sum_{s=1}^r \Delta_s, \quad \Delta_s = -\ell n \left(\frac{\mu_s}{\nu_s} \right). \quad (4.6)$$

Введем обозначения

$$L = \lambda(1 + \Gamma_{01} + \Gamma_{02} + \dots + \Gamma_{0,l-1}), \quad (4.7)$$

$$a = \frac{D(0)}{L}, \quad b = \frac{D(l)}{L} e^{-\Delta(l)}. \quad (4.8)$$

Тогда выражение для потока (4.4) записывается в виде (3.10) с той лишь разницей, что знак суммы в (4.4) заменяется на интеграл в (3.10). Однако для сверхтонких слоев условия такой замены не выполняются. Чаще всего переходные структуры образуются на границах раздела фаз как результат физического или химического взаимодействия активных компонент этих фаз. Не исключено, что и граница расплав-кристалл является слоисто неоднородной, поэтому потоки ПА через такую границу должны описываться уравнениями типа (4.4):

$$j_{es} = a_{ls} C_l(0) - b_{sl} C_s(0). \quad (4.9)$$

Здесь $C_l(0)$ и $C_s(0)$ – концентрации ПА на концах переходного слоя соответственно в d_l - и d_s -зонах. Только в идеальном случае резкой l/s -границы скорости прямого a_{ls} и обратного b_{sl} переходов приобретают упрощенный вид:

$$a_{ls} = \lambda v_{ls}, \quad b_{sl} = \lambda \mu_{sl}, \quad (4.10)$$

где λ – протяженность элементарного перескока ПА из l - в s -фазу.

Следует отметить, что образование переходных структур на границах раздела фаз может оказывать существенное влияние на вольт-амперные, термо- и фотоэлектрические характеристики таких устройств, как барьер Шоттки (металл-полупроводник), а также на катодные и анодные характеристики структур металл-электролит. Однако это вопросы, выходящие за рамки темы данной публикации, поэтому мы здесь не будем их детализировать.

5. Зависимость коэффициентов распределения от режимов роста кристалла

Определение эффективного коэффициента распределения ПА в системе расплав-кристалл дается уравнением (1.10), в котором K_l , K_{ls} и K_s – коэффициенты самосогласованного распределения частиц соответственно в d_l -зоне расплава, на l/s -границе и d_s -зоне кристалла. Вычислим их из условия квазистационарности процесса переноса, согласно которому потоки ПА из объема расплава в «холодную» часть слитка на всех участках системы равны друг другу:

$$j_l = j_{ls} = j_s = j. \quad (5.1)$$

Общее выражение для потоков представлено нами в виде (3.10), в котором a и b могут быть вычислены по формулам (3.11) – (3.12). Подобное выражение может быть записано и для потока j_{ls} (непосредственно через l/s -границу)

$$j_{ls} = a_{ls} C_l(0) - b_{sl} C_s(0). \quad (5.2)$$

Здесь отношение скоростей $a_{ls} = \lambda v_{ls}$ и $b_{sl} = \lambda \mu_{sl}$ переноса частиц через l/s -границу

$$\frac{\mu_{sl}}{v_{ls}} = \Gamma_{ls} = \Gamma_{ls}^0 e^{-\Delta_{ls}} \quad (5.3)$$

содержит энтропийный фактор Γ_{ls}^0 , связанный главным образом с различием атомной структуры ПА в кристалле и расплаве. Для величины Δ_{ls} согласно перескоковой модели запишем следующее выражение:

$$\Delta_{ls} = \frac{\varepsilon_{ls}}{\theta_0} + \frac{\nu_c}{\lambda \nu_{ls}}, \quad (5.4)$$

где ε_{ls} – энтальпия кристаллизации ПА; ν_{ls} – частоты перескоков. В развернутом виде уравнения (4.1) с учетом (3.10) и (5.2) переписуются:

$$\begin{aligned} j &= a_l C_l(-d_l) - b_l C_l(0) = \\ &= a_{ls} C_l(0) - b_{sl} C_s(0) = \\ &= a_s C_s(0) - b_s C_s(d_s) = \nu_c C_s(d_s). \end{aligned} \quad (5.5)$$

Здесь последний член представляет поток конвективного переноса частиц в «холодной» части слитка, где другие формы переноса заморожены.

Решая попарно эти уравнения, находим:

$$K_s = \frac{C_s(d_s)}{C_s(0)} = \frac{a_s}{b_s + \nu_c}, \quad (5.6)$$

$$K_{ls} = \frac{C_s(0)}{C_l(0)} = \frac{a_{ls}}{b_{sl} + \nu_c K_s}, \quad (5.7)$$

$$K_l = \frac{C_l(0)}{C_l(-d_l)} = \frac{a_l}{b_l + \nu_c K_s K_{ls}}. \quad (5.8)$$

С их помощью в соответствии с (1.10) получим эффективный коэффициент распределения

$K = \frac{C_s(d_s)}{C_l(-d_l)}$, который также можно преобразовать к следующему виду:

$$K = \frac{a_l a_{ls} a_s}{b_l b_{sl} b_s + \nu_c (a_s a_{ls} + a_s b_l + b_l b_{sl})}. \quad (5.9)$$

Здесь a и b (индексы опускаем) зависят от кинетических параметров ν и Δ соответственно в d_l - и d_s - зонах и l/s -переходе.

Рассмотрим частный случай, когда $K_s = 1$, т.е. когда в кристалле не происходит перераспределение примесей между горячим и холодным участками слитка. В этом случае, согласно (4.9) с учетом (3.11), находим

$$K = \frac{a_l K_{ls}}{b_l + \nu_c K_{ls}} = \frac{K_{ls}}{\beta_l K_{ls} + (1 - \beta_l K_{ls}) e^{-\Delta_l}}. \quad (5.10)$$

Отметим, что K_{ls} зависит от режимов роста кристалла и определяется выражением (5.7), которое с учетом (3.11) приобретает вид

$$K_{ls} = \left[\beta_{ls} + (1 - \beta_{ls} K_s) \cdot e^{-\Delta_{ls}} \right]^{-1}, \quad (5.11)$$

где $\beta_{ls} = \frac{v_c}{v_{ls}}$; $\Delta_{ls} = \frac{\varepsilon_{ls}}{kT_0} + \frac{v_c \lambda}{D_{ls}} = \frac{v_{ls} \lambda}{D_{ls}}$; $D_{ls} = \lambda v_{ls}$; ε_{ls} – энтальпия переноса ПА из расплава в кристалл; T_0 – температура кристаллизации.

Выражение (5.10) определяется процессами переноса в расплаве (параметрами a_l и b_l) и коэффициентом K_{ls} .

Часто реализуются режимы роста кристаллов, когда $K_l = 1$ (условие полного перемешивания расплава). В этом случае для малоподвижных ионов (с большим ионным радиусом) можно положить $v_s \approx v_c$ и $K_s = 1$. Тогда эффективный коэффициент распределения K будет определяться в основном фильтрационным коэффициентом l/s -перехода, т.е. $K \equiv K_{ls}$. В то же время для ПА с высокой подвижностью в d_s -зоне получаем

$$K = K_{ls} K_s = \frac{K_s}{\beta_{ls} + (1 - \beta_{ls} K_s) e^{-\Delta_{ls}}}, \quad (5.12)$$

где

$$K_s = [\beta_s + (1 - \beta_s) e^{-\Delta_s}]^{-1}. \quad (5.13)$$

Термоупругие силы по-разному действуют на ПА: из области высоких температур и напряжений выталкиваются междоузельные атомы и ПА с большим ионным радиусом, а вакансии и ПА с малым радиусом в замещающем положении перемещаются в противоположном направлении.

Поэтому, согласно (5.13), в первом случае $\beta_s = \frac{v_c}{v_c + v_d + v_\theta}$ и K_s будут > 1 , а во втором $-\beta_s$

и $K_s < 1$.

Вместе с тем фильтрационный коэффициент K_{ls} , наоборот, будет > 1 для ПА с малым ионным радиусом и < 1 для ПА с большим ионным радиусом, а также для междоузельных атомов. Так что эффективный коэффициент K будет определяться компенсирующим действием этих двух факторов. При этом выражение для потока ПА, согласно (5.1), будет иметь вид

$$j = v_c K_s K_{ls} C_l(0), \quad (5.14)$$

где $C_l(0)$ – концентрация ПА в расплаве.

Выводы

1. Для описания переноса ПА в системе расплав-растущий кристалл использованы уравнения типа $j = aC(0) - bC(l)$, в которых a и b определяются скоростями переноса v_c , v_d , v_θ на участке $0 \leq x \leq l$ и концентрациями ПА $C(0)$ и $C(l)$ на границах этого участка.

2. В зависимости от содержания параметров a и b эти уравнения справедливы не только для ПА, но и любых других нейтральных или заряженных квазичастиц. С их помощью можно описывать перенос частиц как через моноатомные слои вещества, так и через многоатомные системы (пленки).

3. Получено выражение для эффективного коэффициента распределения ПА в системе расплав-растущий кристалл $K = K_l \cdot K_{ls} \cdot K_s$, что позволяет анализировать влияние режимов

роста (скорости вытягивания слитка, градиента температур и силовых полей) на перенос и накопление ПА в растущем кристалле.

4. Очень важным является уравнение для потока ПА через l/s -границу (j_{ls}). Входящие в него параметры a_{ls} и b_{sl} учитывают режим роста кристалла (скорости v_c, v_d, v_θ на l/s -границе), и это отличает коэффициент K_{ls} от статического K_0 , который обычно используется для описания распределения ПА на l/s -границе.

В заключение следует отметить, что изложенное может оказаться полезным не только для анализа переноса ПА в системе расплав-кристалл, но и адаптировано к описанию процессов переноса в силовых полях (например, для расчета ВАХ системы электролит-металл), для расчета скорости роста второй фазы (например, окисной пленки).

Список литературы

1. Handbook of Crystal Growth. Vol. 2: Bulk Crystal Growth / Ed. by D. T. J. Hurle. – Amsterdam: North-Holland Elsevier Science Publishers, 1994. – 1299 p.
2. Kasap S.O. Principles of Electronic Materials and Devices / S.O.Kasap. – New York: McGraw-Hill, 2002.
3. Voronkov V.V. The mechanism of swirl defects formation in silicon / V.V.Voronkov // J. Cryst. Growth. – 1982. – V.59. – P.625 – 643.

Calculation of Influence of Growth Conditions on Distribution Coefficient of Impurity Atoms Between Melt and a Growing Crystal

Viktor M. Lenchenko and Yuri Y. Loginov
Siberian Federal University,
79 Svobodny, Krasnoyarsk, 660041 Russia

Streams of impurity atoms on each of sites $0 \leq x \leq l$ of border between melt and a growing crystal are submitted as expression $j \approx aC(0) - bC(l)$ in which a and b are determined through convective v_c , drift v_d and thermal-diffusion v_θ speeds of carry of impurity atoms accordingly in a melt (a_b, b_b), in a crystal (a_s, b_s), and also on border of the unit of phases (a_{sb}, b_{sb}). From a condition of quasistationary process of growth $j_l = j_{ls} = j_s$ the distribution coefficient of impurity atoms concentration on each

of sites $K_l = \frac{C_l(0)}{C_l}$, $K_{ls} = \frac{C_s(0)}{C_l(0)}$, $K_s = \frac{C_s(d_s)}{C_s(0)}$ are found and the general distribution coefficient of

impurity atoms between melt volume and a cooled part of a growing ingot $K = \frac{C_s}{C_l}$ is determined. The

received expression for K allows to analyze influence of modes of growth (speed of a crystal grows v_c , a gradient of temperatures (through v_θ) and force fields (through v_d)) on carry and accumulation of impurity atoms in a growing crystal.

Keywords: impurity atoms; melt; crystal; grows conditions.