#### МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ

Д. ф.-м. н. Г. П. КОВТУН, к. т. н. А. И. КРАВЧЕНКО, А. И. КОНДРИК, А. П. ЩЕРБАНЬ

Украина, ННЦ «Харьковский физико-технический институт» E-mail: gkovtun@kipt.kharkov.ua

Дата поступления в редакцию 24.09 2004 г.

Оппонент  $\partial$ . *т. н. В. К. КОМАРЬ* (Институт монокристаллов, г. Харьков)

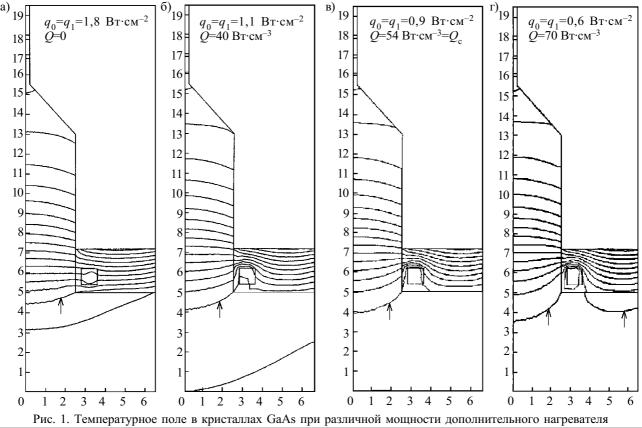
## ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ПРИЕМЫ УЛУЧШЕНИЯ ТЕПЛОВОГО РЕЖИМА ВЫРАЩИВАНИЯ КРИСТАЛЛОВ GaAs МЕТОДОМ ЧОХРАЛЬСКОГО

Лучшие результаты достигаются при боковом варианте нагрева тигля, выбором мощности дополнительного нагревателя, а также применением теплового экранирования кристалла и флюса.

В связи с работой по совершенствованию технологии получения малодислокационных монокристаллов GaAs (см. [1]) представляет интерес компьютерное моделирование теплового поля в растущем кристалле. В первом приближении плотность дислокаций  $N_{\rm D}$  в кристалле как характеристика совершенства кристалла прямо пропорциональна значениям осевого  $G_z$  и радиального  $G_r$  градиентов температуры вблизи фронта кристаллизации. (Более детальный анализ термоупругих напряжений в кристалле связан с представлениями о тензорном характере величины и требует учета кривизны температурного поля, определяемой второй производной температуры [2].)

Целью данной работы было изучение закономерностей формирования теплового поля в кристалле GaAs, выращиваемом методом Чохральского с применением специальных приемов: а) применение дополнительного кольцевого нагревателя вблизи фронта кристаллизации; б) применение теплового экранирования поверхности кристалла и/или поверхности расплаво (поверхности флюса над расплавом).

Расчет теплового поля в кристалле выполнялся с помощью компьютерной программы GALEZ [3], реализующей метод конечных элементов для решения уравнений теплопроводности при заданных тепловых потоках  $q_0$  через дно и  $q_1$  через стенку тигля и удельной мощности тепловыделения Q дополнительного нагревателя. Значения используемых физических констант и параметров расчета взяты из публикаций [4, 5]. Геометрические размеры изучаемой системы «расплав — флюс  $B_2O_3$  — погруженный во флюс дополнительный нагреватель — кристалл» показаны на **рис. 1**. Единица длины



#### МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ

Классификация конструкций тепловых узлов по величине соотношения между тепловыми потоками (стрелка показывает направление теплового потока)

a.	$q_1$		
$q_0$	1) q <sub>1</sub> <0	2) q <sub>1</sub> =0	3) <i>q</i> <sub>1</sub> >0
1) q <sub>0</sub> <0	11   →	12    0	13   ←
2) q <sub>0</sub> =0	21   <u></u>  →	22    0	23   ←
3) <i>q</i> <sub>0</sub> >0	31   →	32    0	33   ←

на осях рисунков равна 1 см, изотермы проведены с интервалом 50 K, изотерма с температурой плавления арсенида галлия 1511 K отмечена стрелкой.

По величине соотношения между тепловыми потоками  $q_0$  и  $q_1$  может быть введена классификация конструкций тепловых узлов, показанная в **таблице**.

Для изучения были выбраны тепловые узлы следующих вариантов: 32 (донный нагрев), 33 (доннобоковой нагрев), 23 (боковой нагрев) и 13 (боковой нагрев с донным теплоотводом). При выполнении расчетов было установлено, что значение удельной мощности Q дополнительного нагревателя не может быть сколь угодно большим: при повышении мощности Q до некоторого критического значения  $Q_{\rm c}$  (зависящего от выбранного соотношения между  $q_{\rm 0}$  и  $q_{\rm 1}$ ) возникает «паразитная» кристаллизация материала на стенке тигля, как это показано на рис. 1,  $\varepsilon$ , что связано с необходимостью снижения значений  $q_{\rm 0}$  и  $q_{\rm 1}$  для сохранения заданного диаметра кристалла при росте величины Q.

Когда дополнительный нагреватель отсутствует или не включен (Q=0), вертикальная составляющая температурного градиента на оси кристалла  $G_z(0)$  и вблизи поверхности кристалла  $G_z(R)$  почти не зависят от соотношения между потоками  $q_0$  и  $q_1$  (**рис. 2**). При включенном дополнительном нагревателе переход от донного нагрева (вариант 32) к донно-боковому (вариант 33) и далее к боковому (вариант 23) и к боковому с донным теплоотводом (вариант 13) сопровождается увеличением критической мощности  $Q_c$  дополнительного нагревателя. При этом уменьшается значение  $G_z(0)$  на оси кристалла (примерно в 2 раза) и, особенно,  $G_z(R)$  на поверхности кристалла (пример

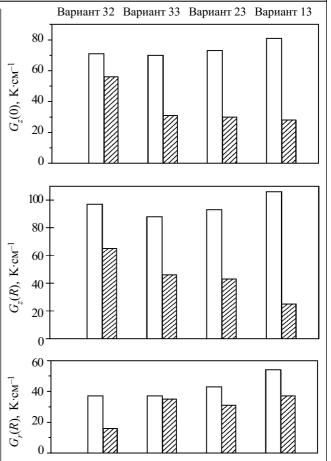


Рис. 2. Зависимость составляющих температурного градиента G(0) на оси и G(R) вблизи поверхности кристалла GaAs от мощности дополнительного нагревателя для различных вариантов основного нагревателя (Q=0 — светлое поле; Q= $Q_{\rm c}$  — темное поле)

но в  $2\frac{1}{2}$  раза, см. рис. 2). Радиальная составляющая  $G_{r}(R)$  в кристалле при этом возрастает примерно в 2 раза (на оси кристалла  $G_{r}(0)=0$ ).

На **рис. 3** показано радиальное распределение значений  $G_z$  и  $G_r$  в кристалле при различных значениях соотношения между  $q_0$  и  $q_1$ . Приведено также радиальное распределение величины модуля  $G=(G_z^2+G_r^2)^{1/2}$  вектора температурного градиента.

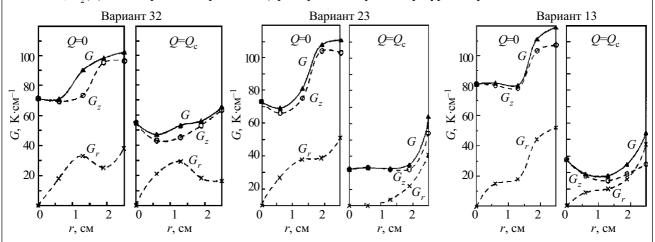


Рис. 3. Радиальное распределение составляющих  $G_z$  и  $G_y$ , а также модуля G температурного градиента в кристалле GaAs

#### МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ

Когда дополнительный нагреватель отсутствует, зависимости  $G_{\underline{\cdot}}(r)$ , а также и G(r), для различных значений соотношения между  $q_0$  и  $q_1$  имеют сходный вид: неравномерный с минимумом при некотором значении радиуса г. При включенном дополнительном нагревателе и  $Q=Q_{c}$  характер зависимостей  $G_{r}(r)$  и G(r) изменяется: при переходе от донного нагрева (вариант 32) к боковому (вариант 23) на графиках  $G_z(r)$  и G(r) исчезает минимум и распределение становится равномерным (за исключением приповерхностной области кристалла). Однако при дальнейшем переходе к боковому нагреву с донным теплоотводом (вариант 13) радиальное распределение значений  $G_r$  и  $G_r$  вновь становится неравномерным.

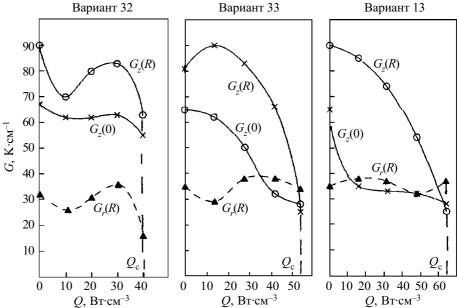


Рис. 4. Зависимости составляющих температурного градиента в кристалле GaAs от мощности дополнительного нагревателя для различных вариантов основного нагревателя

Сложный вид имеют и зависимости составляющих температурного градиента в кристалле от мощности дополнительного нагревателя (**рис. 4**), характер этих зависимостей также связан с величиной соотношения между  $q_0$  и  $q_1$ . Так, в варианте 13 зависимость  $G_z(R)$  монотонно убывает, в то время как в варианте 32 для этой же зависимости наблюдаются промежуточные минимум и максимум.

Увеличение диаметра кольца дополнительного нагревателя сопровождается увеличением критической мощности  $Q_{\rm c}$ , однако достигаемые при этом значения  $G_{\rm z}(r)$  и G(r) заметно превышают значения, достигаемые при малой удаленности нагревателя от поверхности кристалла.

Влияние теплового экранирования изучалось на примере теплового узла с боковым нагревом тигля (вариант 23). Для этого выполнялись расчеты, в которых значения излучательной способности кристалла  $\varepsilon_{\rm c}$  и флюса  $\varepsilon_{\rm f}$  были уменьшены в 10 раз по сравнению со справочными значениями. Результаты расчетов приведены на **рис. 5** и **6**.

Когда дополнительный нагреватель отсутствует или не включен, но применяется тепловое экранирование кристалла и флюса, значение величины  $G_z(0)$  на оси кристалла заметно уменьшается, особенно при совместном экранировании кристалла и флюса, когда  $G_z(0)$  уменьшается примерно в  $2^{1/2}$  раза. (При раздельном экранировании более эффективно экранирование кристалла.)  $G_z(R)$  на поверхности кристалла несколько возрастает при раздельном экранировании кристалла и флюса, но уменьшается при совместном экранировании.

При включении дополнительного нагревателя и увеличении его мощности до величины  $Q_{\rm c}$  значения  $G_z(0)$  и  $G_z(R)$  заметно снижаются, причем лучшие результаты дает экранирование флюса либо совместное экранирование кристалла и флюса. В последнем случае  $G_z(0)$  и  $G_z(R)$  уменьшаются почти в 6 раз по

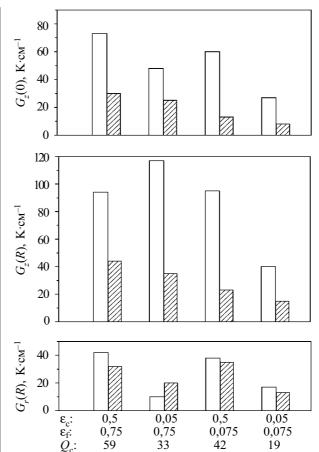


Рис. 5. Зависимость составляющих температурного градиента G(0) на оси и G(R) вблизи поверхности кристалла GaAs от мощности дополнительного нагревателя при боковом нагреве тигля (вариант 23) и различных условиях теплового экранирования кристалла и поверхности флюса:  $\varepsilon_{\rm c}$  и  $\varepsilon_{\rm f}$  — излучательная способность кристалла и флюса, соответственно; Q=0 — светлое поле; Q= $Q_{\rm c}$  — темное поле

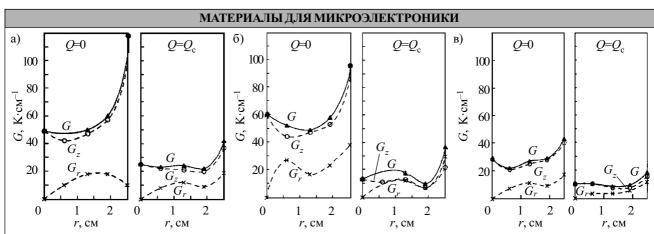


Рис. 6. Радиальное распределение составляющих  $G_z$  и  $G_p$ , а также модуля G температурного градиента при боковом нагреве тигля (вариант 23):

a — при тепловом экранировании кристалла;  $\delta$  — при тепловом экранировании флюса;  $\epsilon$  — при тепловом экранировании кристалла и флюса

сравнению со случаем, когда дополнительное тепловое экранирование и погруженный нагреватель отсутствуют. При этом минимальных значений достигает и  $G_r(R)$ , а радиальное распределение значений  $G_z$  и G становится наиболее равномерным.

Сделаны следующие выводы:

- 1. В случае, когда дополнительный нагреватель отсутствует, значения осевого и радиального температурных градиентов почти не зависят от соотношения между потоками  $q_0$  и  $q_1$ .
- 2. Мощность дополнительного нагревателя имеет предел (критическая мощность), превышение которого приводит к возникновению «паразитной» кристаллизации материала на стенке тигля.
- 3. Значение критической мощности дополнительного нагревателя возрастает при переходе от донного нагрева тигля  $(q_0>0,\ q_1=0)$  к донно-боковому  $(q_0>0,\ q_1>0)$  и далее к боковому  $(q_0=0,\ q_1>0)$  и боковому с донным теплоотводом  $(q_0<0,\ q_1>0)$ . При этом уменьшается осевой температурный градиент на оси кристалла (примерно в 2 раза) и вблизи поверхности (примерно в  $2^{1/2}$  раза) и возрастает радиальный градиент (примерно в 2 раза вблизи поверхности кристалла).
- 4. Форма радиального распределения осевого и радиального температурных градиентов при отсутствии дополнительного нагревателя почти не зависит от соотношения между тепловыми потоками  $q_0$  и  $q_1$ . При включенном дополнительном нагревателе величина соотношения между  $q_0$  и  $q_1$  влияет на форму радиального распределения значений осевого и радиального температурного градиентов; наиболее равномерное распределение значений осевого градиента и модуля температурного градиента достигается в варианте бокового нагрева тигля.

- 5. Характер зависимости осевого температурного градиента от мощности дополнительного нагревателя зависит от соотношения между  $q_0$  и  $q_1$ : при донном нагреве тигля зависимость имеет промежуточные минимум и максимум, в то время как при боковом нагреве с донным теплоотводом эта зависимость является монотонно убывающей.
- 6. Лучшие результаты с учетом значений осевого и радиального температурных градиентов, а также равномерности их радиального распределения, достигаются при боковом варианте нагрева тигля и мощности дополнительного нагревателя, близкой к критической величине, с применением теплового экранирования кристалла и флюса. В этом случае значения осевого и радиального температурного градиента уменьшаются в несколько раз.

### ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ИСТОЧНИКИ

- 1. Ковтун Г. П., Кравченко А. И., Щербань А. П. Установка для выращивания малодислокационных монокристаллов GaAs большого диаметра // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. 2001. № 6. С. 52—53.
- 2. Мильвидский М. Г., Освенский В. Б. Структурные дефекты в монокристаллах полупроводников.— М.: Металлургия, 1984.
- 3. Жуков А. И. Расчет температурных полей в кристаллах, выращиваемых по методу Чохральского // Препринт ХФТИ 92-17.— Харьков: ХФТИ, 1992.
- 4. Growley A. B., Stern E. J., Hurle D. T. J. Modelling of the growth of GaAs by LEC technique. 1. Thermal distribution in the crystal // J. Cryst. Growth.— 1989.— Vol. 97, N 3.— P. 697—708.
- 5. Moduoye G. O., Bacon D. J., Evans K. E. Computer modelling of temperature and stress distribution in LEC-grown GaAs crystals // Ibid.— 1991.— Vol. 108, N 2.— P. 627—636.

# > 220 лет со времени установления (1785) француз-

- ским ученым Ш.-О. Кулоном основного закона электростатики (закона Кулона). > 150 лет назад (1855) итальянский метеоролог Л. Паль-
- 7 130 лет назад (1633) итальянский метеоролог л. нальмиери изобрел сейсмограф для измерения силы землетрясений.
- ▶ 50 лет назад (1955) в США создан первый транзисторный компьютер.
- Из "Календаря юбилейных и памятных дат в области естествознания и техники на 2005 год".— М.: Политехнический музей, 2004.

#### ПАМЯТНЫЕ ДАТЫ В 2005 ГОДУ

- ➤ 150 лет назад (1855) английский физик и изобретатель Д.-Э. Юз запатентовал созданный им буквопечатающий телеграфный аппарат.
- № 125 лет назад (1880) русский ученый-физик и биофизик П. И. Бахметьев создал проект одноканальной телевизионной системы со спиральной оптико-механической разверткой изображения ("телефотограф").
  № 125 лет назад (1880) открыт пьезоэлектрический эффект французскими учеными физиком П. Кюри и кристаллографом Ж. Кюри.