

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Российская академия наук

Российский национальный комитет
по теоретической и прикладной механике

ХІІІ ВСЕРОССИЙСКИЙ СЪЕЗД ПО ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И ПРИКЛАДНОЙ МЕХАНИКЕ

Сборник тезисов докладов в 4 томах

21–25 августа 2023 года
Санкт-Петербург

Т о м 4

МАТЕРИАЛЫ СИМПОЗИУМОВ
И ИСТОРИЧЕСКОЙ СЕССИИ



ПОЛИТЕХ-ПРЕСС

Санкт-Петербургский
политехнический университет
Петра Великого

Санкт-Петербург
2023

УДК 531/534
ББК 22.2
В85

ХIII Всероссийский Съезд по теоретической и прикладной механике : сборник тезисов докладов в 4 томах, 21–25 августа, 2023 г., Санкт-Петербург. Т. 4. Материалы симпозиумов и Исторической сессии. – СПб. : ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2023. – 938 с.

Том 4 содержит расширенные тезисы устных и стендовых докладов одиннадцати симпозиумов и Исторической сессии.

ISBN 978-5-7422-8283-9 (т. 4)
ISBN 978-5-7422-8279-2
doi:10.18720/SPBPU/2/id23-630

© Российская академия наук, 2023
© Российский национальный комитет
по теоретической и прикладной механике, 2023
© Санкт-Петербургский политехнический
университет Петра Великого, 2023

ИННОВАЦИОННЫЕ ЗАДАЧИ МЕХАНИКИ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ МОНОКРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЯ

Простомолотов А.И., Везуб Н.А.

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН
aprosto@inbox.ru

Аннотация. Задачи механики процессов получения бездислокационных монокристаллов кремния являются актуальными и технически значимыми в связи с интенсивным развитием микроэлектроники, которая предъявляет все более высокие требования по минимизации уровня микро- и нанодфектов в пластинах кремния, используемых для изготовления электронных микросхем. Решение этих задач связано с изучением закономерностей термомеханических процессов как на стадии выращивания монокристаллов кремния, так и на последующих термообработках вырезаемых из них пластин. Обсуждаются постановка и решение таких задач применительно к выращиванию бездислокационных монокристаллов кремния большого диаметра методом Чохральского и моделированию дефектообразования в них.

Работа выполнена по теме госзадания ИПМех РАН (№ госрегистрации 123021700045-7).

Введение

Оптимизация тепловых условий при выращивании монокристаллов кремния по методу Чохральского (МЧ) диаметром 200 мм на Российской установке *Редмет-90М* (Рис. 1а) заключается в эффективном управлении температурным полем в растущем монокристалле с помощью надлежащего выбора конструкции и расположения тепловых экранов в тепловом узле (ТУ). Вопросам влияния различных тепловых экранов на температурное поле в растущем кристалле посвящен ряд патентов ведущих фирм-производителей монокристаллического кремния. Их важность особенно актуальна для выращивания бездислокационных монокристаллов кремния большого диаметра с контролируемой природой, размером и распределением первичных ростовых микродефектов. Для инновационной Российской установки *Редмет-90М*, предназначенной для выращивания монокристаллов кремния большого диаметра 200 – 250 мм нами были предложены конструкции теплового экрана, оптимизирующие тепловое поле в растущем монокристалле кремния [1, 2] в отсутствие и при наличии водяного охлаждения этого экрана.

В инновационные задачи гидромеханики входит также изучение влияния скорости вращения тигля на теплоперенос в расплаве, которое представляет большой научный [3] и практический интерес [4]. Особое внимание обращено на изменение азимутальной скорости расплава в подкристалльной области при увеличении скорости вращения тигля, вызывающее изменение формы фронта кристаллизации (ФК). Поведение радиальной неоднородности азимутальной скорости при изменении скорости вращения тигля исследуется при различной интенсивности тепловой конвекции в расплаве, что развивает фундаментальные представления об «эффекте максимума» для других субстанций (температура и концентрация примеси), впервые изложенные в [5]. Возможности тепловой оптимизации исследованы на основе интегрированной математической модели при использовании комплекса программ *Crystmo/Marc* [6], апробированного ранее [7, 8].

Задачи механики дефектов в бездислокационных монокристаллах кремния являются актуальными и технически значимыми в связи с интенсивным развитием микроэлектроники, которая предъявляет все более высокие требования по минимизации уровня микро- и нано-дефектов в пластинах кремния, используемых для изготовления электронных микросхем. Решение этих задач связано с изучением закономерностей термомеханических процессов как на стадии выращивания монокристаллов кремния, так и при последующих термообработках вырезаемых из них пластин.

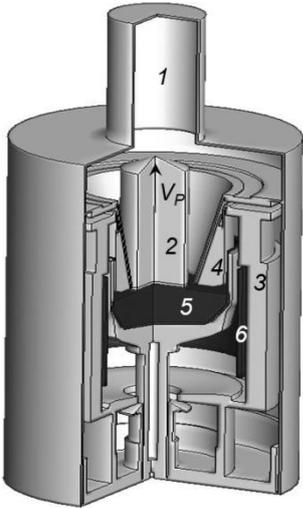
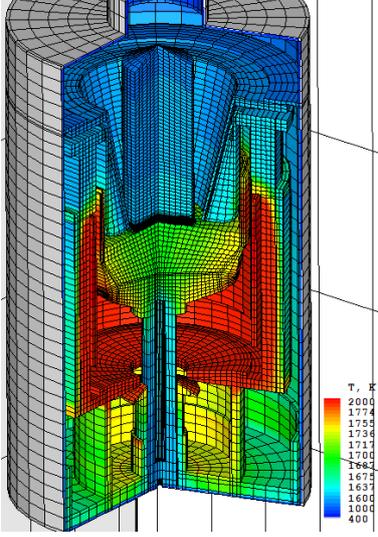
В докладе дается обзор теоретических и экспериментальных работ направленных на разработку способов управления процессами механики при выращивании монокристаллов. Это включает развитие физических представлений о дефектообразовании в бездислокационном монокристаллическом кремнии и разработку математических моделей, соответствующих различным температурным диапазонам, реализуемым как при выращивании монокристалла, так и при термообработке, вырезаемых из него пластин.

Термомеханическое моделирование процесса выращивания монокристаллов

Устройство для МЧ-выращивания кристаллов является высокотемпературным ТУ, который конструируется таким образом, чтобы реализовать процесс роста с соблюдением основных технических требований (замкнутость системы, аксиальная симметрия, обеспечение плавления и кристаллизации материала). Повышение экономичности ТУ достигается путем выбора лучших теплоизоляционных материалов, оптимизации расположения тепловых экранов. Любая модификация конструкции ТУ испытывается с точки зрения возможности улучшения выходных параметров выращиваемого кристалла.

Термомеханическая модель, расчетная сетка объемных конечных элементов и рассчитанное тепловое поле в установке *Редмет-90М* показаны на Рис. 1б и Рис. 1в. В термомеханических расчетах предполагалось, что движение расплава описывается уравнениями Навье-Стокса для вязкой несжимаемой жидкости,

обладающей постоянными теплофизическими свойствами. Считаются постоянными коэффициенты вязкости, теплопроводности, теплоемкости, диффузии. Изменение плотности в неоднородном по температуре и составу расплаве учитывается в приближении Буссинеска, которое следует из уравнений Навье-Стокса сжимаемой жидкости в предположении, что жидкость динамически и статически несжимаемая, т.е. ее плотность не зависит от давления, но может зависеть от температуры и концентрации примеси.

		
<p>Рис. 1а. Инновационная Российская установка <i>Редмет-90М</i> для выращивания монокристаллов кремния большого диаметра (200 – 250 мм).</p>	<p>Рис. 1б. Термомеханическая модель установки <i>Редмет-90М</i>: 1 – корпус, 2 – кристалл, 3 и 4 – тепловые экраны, 5 – расплав, 6 – нагреватель; V_p – скорость вытягивания кристалла.</p>	<p>Рис. 1в. Расчетная сетка конечных элементов и рассчитанное тепловое поле в установке <i>Редмет-90М</i>. Градация цветов соответствует приведенной шкале значений температуры (К).</p>

Граничные условия для скорости течения расплава соответствуют условию прилипания на твердых стенках тигля и ФК, скольжению вдоль открытой поверхности расплава. Граничные тепловые условия задаются распределениями температур на границах расплава из решения задачи глобального теплообмена в конкретном ТУ. Совместно с уравнениями конвективного теплопереноса в расплаве решается трехмерное уравнение конвективного переноса кислорода, рассматриваемого как пассивная примесь (не оказывающая влияние на течение и теплообмен в расплаве).

Результатом термомеханического моделирования является «тепловая история» конкретного монокристалла, в которой содержатся рассчитанные данные тепловых параметров, включающие значения осевого температурного градиента на ФК в центре (на оси) – G_a и на кромке выращиваемого монокристалла – G_e для дискретных моментов времени процесса. Этот набор параметров и соответствующие значения скорости вытягивания монокристалла V_p являются исходными данными для моделей дефектообразования, которые позволяют адекватно учесть тепловые условия выращивания монокристалла кремния в конкретном ТУ.

Моделирование дефектообразования в бездислокационных монокристаллах кремния

В статье [9] предложена физическая концепция взаимодействия собственных точечных дефектов (СТД) – вакансий (i) и междузельных атомов кремния (v) применительно к процессу выращивания монокристаллического бездислокационного кремния. Согласно этой концепции, вблизи ФК происходит «быстрая» v-i-рекомбинация, в результате которой монокристалл растет с преобладанием i- или v-дефекта (т.е. в вакансионном или междузельном режиме). Впервые была предложена количественная оценка этого эффекта по величине ξ_{crit} , определяемой в виде отношения скорости V_p к осевому градиенту температур G_S на ФК. Так, при $\xi = V_p/G_S < \xi_{crit}$ доминируют междузельные атомы, а при $\xi > \xi_{crit}$ – вакансии. Если осевой градиент температуры значительно изменяется в радиальном сечении растущего м/к кремния, то величина ξ становится больше ξ_{crit} и в центральной части слитка преобладают вакансии, а при меньшей ξ_{crit} на периферии слитка – междузельные атомы. Однако математическая модель этой концепции была представлена только в одномерной (по оси слитка) формулировке.

Представление «тепловой истории» выращиваемого кристалла в аналитической форме позволяет запоминать и хранить температурные поля для всего процесса выращивания, что необходимо на этапах реализации нестационарной модели СТД-переноса и v-i-рекомбинации. Сущность этой методики состоит в представлении температурных распределений вдоль оси и кромки кристалла в виде полиномов (обычно

высокой 6 – 8-ой степени). Они рассчитываются по температурным полям в кристалле для каждой расчетной ростовой стадии (всего до 20 стадий).

Расчет концентрации микродефектов в кристаллах выполняется за три этапа. На первом этапе рассчитываются тепловые поля в ТУ, необходимые для определения распределения температуры в монокристаллах кремния. На втором этапе определяются остаточные концентрации СТД после v - i -рекомбинации. Третий этап заключается в расчете концентрации и размеров микродефектов вакансионного типа (пор, оксидных частиц) и кластеров, образующихся в результате агломерации межузельных атомов кремния. В результате решения задачи определяется v - i -граница микродефектов во всем объеме слитка. Ее расположение в объеме выращенного монокристалла зависит от входных параметров расчетной модели. Поэтому для её верификации были проведены специальные ростовые процессы и выращены тестовые монокристаллы кремния, для которых построены объемные карты времени жизни электрических носителей, которые экспериментально подтвердили расчетные результаты.

Заключение

На основе сопряженной термомеханической модели определены закономерности формирования температурных полей в кристалле в зависимости от формы и положения тепловых экранов применительно к инновационной Российской установке *РЕДМЕТ-90М*, предназначенной для выращивания монокристаллов кремния большого диаметра (200 – 250 мм). По результатам параметрических расчетов были предложены оригинальные конструкции тепловых экранов, позволяющие контролировать величины осевых температурных градиентов и минимизировать их радиальную неоднородность вблизи ФК.

Успешно решена проблема расчета дефектообразования в бездислокационных монокристаллах кремния. Методической основой был расчет необходимых данных о термомеханических процессах при выращивании монокристаллов кремния в конкретном ТУ установки *РЕДМЕТ-90М* и последующее использование этих данных в фундаментальной физической модели дефектообразования на основе «быстрой» v - i -рекомбинации. В результате сопряженного применения моделей термомеханики и дефектообразования были рассчитаны v - i -границы в выращенных монокристаллах, достоверность которых подтверждена экспериментальными картами времени жизни электрических носителей.

Литература

1. А.И. Простомолотов, Н.А. Везеуб, В.Ю. Жвирблянский, М.Г. Мильвидский // Устройство для выращивания монокристаллов кремния методом Чохральского, Патент RU2355834 (С1) ГНУ ИХПМ 20.05.2009.
2. А.И. Простомолотов, Н.А. Везеуб, В.Ю. Жвирблянский, М.Г. Мильвидский // Устройство для выращивания монокристаллов кремния методом Чохральского, Патент RU2382121 (С1) ГНУ ИХПМ 20.02.2010.
3. S. Togawa, K. Izunome, S. Kawanishi et al. // Oxygen transport from a silica crucible in Czochralski silicon growth, J. Crystal Growth, 165 1996. 362–371.
4. S.I. Kimbel, H.W. Korb // Apparatus for rotating a crucible of a crystal pulling machine, Patent US 5593498 C.F. Hall 14.01.1997.
5. V.I. Polezhaev, K.G. Dubovik, S.A. Nikitin et al. // Convection during crystal growth on earth and space, J. Crystal Growth, 52 1981. 465–470.
6. A.I. Prostomolotov, N.A. Verezub // Integrated approach for modeling of heat transfer and microdefect formation during CZ silicon single crystal growth, Solid State Phenomena, 131–133 2008. 283–288.
7. А.И. Простомолотов, Н.А. Везеуб, Х.Х. Ильясов // Программа *Crystmo/Marc* для сопряженного теплового моделирования, Свидет. РФ о рег. программы для ЭВМ № 2009613989 27.07.2009.
8. Н.А. Везеуб, А.И. Простомолотов // Исследование теплопереноса в ростовом узле процесса Чохральского на основе сопряженной математической модели // Известия ВУЗов. Материалы электронной техники, 3 2000. 28–34.
9. V.V. Voronkov // The mechanism of swirl defects formation in silicon, J. Crystal Growth, 59 1982. 625–643.