

ЛОКАЛЬНА СТРУКТУРА РОЗПЛАВУ КРЕМНІЮ

Запорізька державна інженерна академія

Розплави кремнію беруть участь у кристалізації при вирощуванні монокристалів для мікроелектроніки. В деяких випадках рідка фаза утворюється навіть при виготовленні наноструктур за методами газозфазної або електронно-променевої епітаксії (механізм «пара – рідина – кристал»). Тому дослідження локальної структури розплавів напівпровідників актуально для теорії й практики створення різноманітних структур мікро- та нанотехнологій.

Відомо, що речовина в рідкому стані є важким об'єктом для встановлення не тільки кількісних, а навіть якісних закономірностей, особливо при високих температурах. Ця обставина підвищує доцільність використання методів математичного моделювання для поглиблення уявлень про характер упорядкування атомів в рідині, а також про фізичні процеси, що відбуваються в ній на атомно-молекулярному рівні. Хоча в рідині відсутній дальній порядок в розташуванні атомів, в ній існує регулярна структура в межах найближчих сусідніх координативних сфер, тобто ближній порядок. Наявність в розплавах металів впорядкованих мікроутворень, структура яких повторює структуру відповідних кристалів, доказана експериментально багатьма дослідниками. Присутність в розплаві германію впорядкованих мікроутворень у формі атомних кланцюжків впливає з результатів статистико-геометричного аналізу даних дифракційного розсіювання їм рентгенівських променів. Враховуючи кристалохімічну подібність кристалічних решіток кремнію й германію, припускаємо, що розплав кремнію теж містить мікрокластери ланцюжкової форми. Розглядаємо гамма-розподіл за розмірами мікрокластерів ланцюжкової форми щільність ймовірностей якого описуємо функцією

$$f(n) = \frac{(n\epsilon)^{\alpha}}{\Gamma(\alpha)\theta \exp\left(\frac{n\epsilon}{\theta}\right)}, \quad (1)$$

де $\Gamma(\alpha) = \int_0^{+\infty} t^{\alpha-1} e^{-t} dt$ – гамма-функція. Розмір кластера характеризуємо сумарною довжиною ланок ланцюжка L в безрозмірному вигляді n : $n = L/l_c$, де $l_c = 0,235$ нм - відстань між найближчими сусідами в кристалах кремнію.

Параметр зсуву обираємо $c = -1$, параметр форми α і параметр масштабу θ конструємо з відомих експериментальних залежностей структурно чутливих фізичних параметрів розплаву, які впливають на процес кластеризації - динамічної в'язкості η та густини розплаву d :

$$\alpha = \frac{\eta T}{\eta T_B}, \quad (2) \quad \theta = \frac{\frac{\eta T}{\eta T_B} + \frac{\eta T_m}{\eta T_B} + \frac{\eta T_B}{\eta T_B}}{\frac{\eta T}{\eta T_B} + \frac{\eta T_m}{\eta T_B}}, \quad (3)$$

де T – температура, К; T_m - температура плавлення, К; T_B - температура кипіння, К.

В результаті такого статистичного моделювання вперше оцінено склад мікрокластерів ланцюжкової форми в розплаві кремнію при критичних температурах: при температурі плавлення середня кількість атомів у ланцюжку 2,77, а максимально ймовірна їхня кількість – ≈ 2 ; при температурі кипіння максимальна щільність ймовірностей відповідає поодиноким атомам, а середня кількість атомів у ланцюжку 1,25.