

ВОЗМОЖНЫЕ НЕРАВНОВЕСНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В АТМОСФЕРЕ СОБСТВЕННЫХ ДЕФЕКТОВ КРЕМНИЯ

Светлов-Прокопьев Е.П., ¹Дягилев В.В., Т.Л.Разинкова, ¹Тимошенко С.П.

ГНЦ РФ Институт теоретической и экспериментальной физики,
117218, Москва, ул. Б.Черемушкинская, 25, Россия

¹Московский государственный институт электронной техники (Технический университет)
124498, Москва, Зеленоград, Россия

Хорошо известно (например, [1]), что в процессе энергетических воздействий на кремний наблюдается нарушение равновесия в системе примесных и собственных дефектов [2] (это прежде всего точечные дефекты: собственные междоузельные атомы кремния I и вакансии V). При этом, как показано в [2], в открытых системах концентрациям собственных и примесных атомов возможно присуще бистабильных состояний, переход между которыми аналогичен фазовым переходам первого и второго рода, являющих собой примеры самоорганизации [3]. Для этого было сделано предположение о том, что наряду с квазихимическими реакциями стандартного типа [1-3] (например, реакции прямой аннигиляции I и V и реакции захвата I и V ловушками (стоками)) могут осуществляться реакции ударной генерации и оже-рекомбинации I и V [2]. Именно в этом случае стационарные состояния в системе дифференциальных уравнений химической кинетики реакций дефектов могут претерпевать изменения, когда параметр системы достигает критического (бифуркационного) значения. Действительно, облучение кремния равносильно локальному перегреву слоя, в который проникают частицы. Оценить эффект перегрева можно, сравнив частоту скачков (константу скорости) атома из регулярного положения в процессе облучения и без него.

После облучения облученный слой остается «перегретым», так как продолжают скачки атомов под действием внутренних напряжений, возникших после облучения. При этом число избыточных скачков (на один атом в слое) после облучения будет пропорциональна остаточным напряжениям, число которых при достаточно малых временах облучения (тем меньших, чем выше температура) пропорциональна времени облучения. На языке квазихимических реакций Шлегля (1), (2) [3] (см. ниже) при наличии большой избыточной концентрации междоузельных атомов кремния I в облучаемой (облученной) области наряду с обычными тепловыми скачками атомов кремния из междоузельных положений (реакция (1)) возможно осуществление индуцированного процесса высвобождения атомов кремния из узельных положений за счет взаимодействия его с междоузельным атомом (реакция (2)) с переходом их в междоузельные состояния и образования вакансии V за счет взаимодействия с собственными атомами кремния, описываемого квазихимической реакцией с автокаталитической стадией (2).



Отметим, что прямая реакция (2) представляет собой бимолекулярную реакцию, в то время как обратная реакция (2) является тримолекулярной. Ее вероятность примерно на три порядка меньше вероятности бимолекулярной прямой реакции (2). По-видимому такого же типа процессы возможны и с участием вакансий в случае их большого избытка в объеме.

На основании проведенных расчетов [2] в рамках синергетических подходов [3] можно сделать практически важные выводы. В образцах кремния, содержащих большие концентрации C_I собственных междоузельных атомов кремния, при термообработках и наличии определенного рода ловушек (в нашем случае вакансий) C_V величина C_I может претерпевать синергетический неравновесный фазовый переход второго рода: $C_I = 0$ при $C_V \geq C_V^{kp}$ и $C_I = C_I$ (конечное значение) при $C_V \leq C_V^{kp}$. Скорость такого перехода изменяется скачкообразным образом и вероятно очень велика. Наличие таких бистабильных состояний дает возможность при определенных условиях (например, создание вакансий в процессе облучения) осознанно контролировать наличие собственных междоузельных атомов в кремнии. Особое значение приобретают в связи с этим экспериментальные исследования синергетических эффектов при синтезе и эксплуатации этих технически важных материалов самыми различными физическими и химическими методами. Это возможно позволит установить, какие из сценариев синергетических моделей при определенных задаваемых параметрах внешней среды реализуются в процессе эволюции атмосферы собственных дефектов, например, кремния. Пожалуй, это передний край развития науки и технологии современного электронного материаловедения.

Таким образом, проведенное выше рассмотрение эволюции свойств технически важных материалов атомной и электронной техники на примере кремния на основании простых моделей Шлегля, подтверждает постулат Пригожина и Николиса о том, что механические свойства материалов невозможно рассматривать на чисто механической основе. Их следует рассматривать как часть общей проблематики нелинейных динамических систем, работающих вдали от равновесия (постулат И.Р.Пригожина). Особое значение приобретают в связи с этим экспериментальные исследования синергетических эффектов при синтезе и эксплуатации этих технически важных материалов самыми различными физическими и химическими методами. Это возможно позволит установить, какие из сценариев синергетических моделей при определенных задаваемых параметрах внешней среды реализуются в процессе эволюции атмосферы собственных дефектов, например, кремния [4-9].

1. А.И.Баранов, А.В.Васильев, Н.И.Коноплева и др. ФТП **18**, 12, 127 (1984).
2. Е.П.Прокопьев. Высокочистые вещества **5**, 24 (1995)
(см. также <http://www.prokopep.narod.ru>).
3. F. Schlögl. Zs. Phys. **253**, 147 (1972).
4. Е.П.Прокопьев. Письма в ЖТФ. **18**, 80 (1992).
5. А.Л.Суворов, В.П.Бабаев, В.И.Графутин, А.Г.Залужный, Е.П.Прокопьев. ВАНиТ (Саров). **1,2**, 220 (2002).
6. Tong Q.-Y., Gösele U. Semiconductor Wafer Bonding: Science, Technology. Wiley, New York. 1998.
7. А.Л.Суворов, В.И.Графутин, А.Г.Залужный, М.А.Козодаев, Е.П.Прокопьев, Б.Ю.Шарков, Ю.А.Чаплыгин, С.П.Тимошенко, В.Ф.Реутов. Атомная энергия. **91**, 255 (2001).
8. Е.П.Прокопьев, С.П.Тимошенко, А.Л.Суворов, Ю.А.Чаплыгин, В.И.Графутин, А.Г.Залужный. Материаловедение. **3**, 11 (2002); **4**, 10 (2002).
9. Шелль Э. Самоорганизация в полупроводниках. М.: Мир, 1991. 459 с.