

01;04;05

Динамика плавления и кристаллизации монокристаллического кремния при воздействии компрессионных плазменных потоков

© С.И. Ананин,¹ В.М. Асташинский,¹ А.С. Емельяненко,¹ Е.А. Костюкевич,¹ А.М. Кузьмицкий,¹
С.П. Жвавий,² В.М. Анищик,³ В.В. Углов,³ А.В. Пунько³

¹ Институт молекулярной и атомной физики НАН Белоруссии,
220072 Минск, Белоруссия
e-mail: ananin@imaph.bas-net.by

² Институт электроники НАН Белоруссии,
220090 Минск, Белоруссия

³ Белорусский государственный университет,
220080 Минск, Белоруссия

(Поступило в Редакцию 28 сентября 2004 г. В окончательной редакции 10 января 2006 г.)

Приведены результаты численного моделирования процессов плавления и кристаллизации пластин из монокристаллического кремния при воздействии компрессионными плазменными потоками, генерируемыми квазистационарными плазменными ускорителями, с учетом кинетики фазовых превращений на основе уравнения Колмогорова. Обсуждаются временные и пространственные характеристики процессов плавления и кристаллизации для импульсов различной формы. На основе полученных данных и проведенных оценок сделан вывод о существенной роли термоэлектрической неустойчивости в формировании объемных периодических структур.

PACS: 81.10.Aj, 52.77.-j

В работах [1–3] было впервые показано, что при воздействии на монокристаллический кремний компрессионным плазменным потоком, генерируемым квазистационарными плазменными ускорителями типа магнито-плазменный компрессор [4,5], на поверхности кремния формируются объемные периодические структуры субмикронных размеров, изучение которых представляет большой интерес для разработки микроэлектронных устройств. Для выяснения механизма образования таких структур необходимо рассмотреть процессы плавления и кристаллизации кремния при условиях воздействия на кремний компрессионным плазменным потоком. В первую очередь, важно определить характерные глубины распространения расплава в кремниевых пластинах, значения градиентов температуры и времен завершения кристаллизации при различных режимах воздействия. В [1–3] были высказаны предположения относительно механизма формирования структур в результате процессов быстрой кристаллизации расплавленного слоя на фоне развития различного рода неустойчивостей. Такие неустойчивости могут возникать в результате реализации, например, термоэлектрического механизма возбуждения [6], способного приводить к возникновению ячеистого движения. Анализ динамики плавления и кристаллизации кремния может способствовать определению механизма формирования периодических структур.

Мощное и кратковременное воздействие концентрированных потоков на полупроводник вызывает сильную неравновесность процессов, протекающих в приповерхностной области [7], поэтому для адекватного описания перекристаллизации необходимо включить в модель температурные зависимости скоростей происходящих фазовых превращений. При традиционной поста-

новке задачи Стефана ограничиваются рассмотрением тепловой стороны фазового перехода, т.е. изучается влияние различных условий теплоотвода от фронта фазового перехода на скорость изменения размеров областей, занятыми жидкой и твердой фазами. При этом температура на границе раздела фаз считается совпадающей с температурой плавления T_m , а кинетика фазовых превращений не рассматривается. Такой подход оправдан при слабой неравновесности, т.е. когда выделяемая (поглощаемая) скрытая теплота фазового перехода успевает компенсироваться теплоотводом. В обобщенной постановке задачи Стефана [8] перегрев (переохлаждение) $\Delta T = T - T_m \neq 0$ и меняется с течением времени t . Изменение ΔT определяется соотношением теплового воздействия фазового перехода и интенсивности теплоотвода от границы раздела фаз. Для определения $\Delta T(t)$ используются уравнения кинетики кристаллизации. При анализе последовательной кристаллизации зависимость скорости роста от переохлаждения определяется рельефом поверхности раздела фаз [9]. Если атомы из расплава могут встраиваться в кристалл в любой точке его поверхности, которая предельно „шероховата“, то реализуется „нормальный“ механизм роста кристаллов, при котором скорость роста $V \sim \Delta T$. В случае атомарно-гладкой поверхности раздела фаз последовательные слои возникают путем формирования двумерных зародышей (механизм послойного роста), и в этом случае вид функции $V(\Delta T)$ значительно сложнее, так как определяется частотой зародышеобразования и скоростью разрастания „ступени“.

В настоящей работе моделирование процессов плавления и кристаллизации монокристаллического кремния при воздействии на его поверхность компрессионного

плазменного потока проведено на основе одномерного уравнения теплопроводности с привлечением уравнения Колмогорова для описания кинетики фазовых переходов. Аналогичный подход был использован ранее [10] для моделирования фазовых превращений монокристаллического кремния при воздействии на его поверхность наносекундного лазерного излучения. При этом предполагалось, что как плавление, так и кристаллизация происходят в результате гомогенного зародышеобразования по двумерному механизму послыного роста. На основе такой модели удалось описать динамику распространения двухфазной зоны в течение всего времени воздействия. В работе [11] был проведен расчет кристаллизации слоя расплава кремния и динамики возникающих при этом термоупругих напряжений, способных деформировать подложку.

Изменение температуры монокристаллического кремния при воздействии на его поверхность компрессионным плазменным потоком можно описать на основе уравнения теплопроводности в виде

$$\rho(T)c(T)\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[k(T)\frac{\partial T}{\partial x} \right] - \rho(T)L \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} - \frac{\partial \psi}{\partial t} \right), \quad (1)$$

где $\rho(T)$ — плотность, $c(T)$ — удельная теплоемкость, $k(T)$ — коэффициент теплопроводности, L — скрытая теплота фазового перехода. Последний член в правой части уравнения (1) описывает мощность тепловых стоков и источников при плавлении и кристаллизации кремния. Здесь $\varphi(x, t)$ — доля расплава, образовавшегося в точке x к моменту времени t после начала плавления, а $\psi(x, t)$ — доля закристаллизовавшегося расплава в точке x к моменту времени t после начала кристаллизации.

В рассматриваемой модели кинетика фазовых превращений описывается на основе уравнения Колмогорова [12–14]. В рамках такого подхода доля образовавшейся новой фазы в момент времени t выражается через частоту зародышеобразования $J(t)$ и скорость роста $V(t)$ по формуле

$$\varphi(x, t) = 1 - \exp \left\{ -\beta_f \int_{t_1}^t J(\tau) \left[\int_{\tau}^t V(t') dt' \right]^n d\tau \right\}, \quad (2)$$

где β — коэффициент формы, t_1 — время начала зародышеобразования в точке x . Показатель степени n может принимать значения 3, 2 или 1, что соответствует трех-, двух- или одномерному механизмам роста. По классической теории гомогенной нуклеации [12,13] частота зародышеобразования определяется выражением

$$J(t) = N \frac{k_B T}{h_P} \exp \left(-\frac{U_a}{k_B T} \right) \exp \left(-\frac{W_{cr}}{k_B T} \right), \quad (3)$$

где N — число атомов в единице „объема“ метастабильной фазы (при $n = 2$ это число атомов на единицу поверхности), U_a — энергия активации перехода атома через границу раздела фаз, W_{cr} — работа образования

критического зародыша, h_P — постоянная Планка, k_B — постоянная Больцмана.

Определим наиболее вероятный механизм зародышеобразования для рассматриваемых условий воздействия. Величина W_{cr} выражается через критический размер зародыша ρ_{cr} и может быть представлена для трех- и двумерного механизмов зарождения в виде [12]

$$W_{cr}^{(3)} = \frac{2}{3} \pi \rho_{cr}^2 \sigma, \quad \rho_{cr}^{(3)} = \frac{2\sigma T_m}{L\Delta T}, \quad (4)$$

$$W_{cr}^{(2)} = \pi a \rho_{cr} \sigma, \quad \rho_{cr}^{(2)} = \frac{\sigma T_m}{L\Delta T}, \quad (5)$$

где σ — поверхностная энергия раздела фаз, $\Delta T = T - T_m$ — величина перегрева монокристалла при плавлении и $\Delta T = T_m - T$ — величина переохлаждения расплава при кристаллизации, a — межатомное расстояние (высота монослоя).

Сопоставляя выражения (4) и (5), можно определить, реализация какого из механизмов зародышеобразования наиболее вероятна [12]

$$\frac{W_{cr}^{(3)}}{W_{cr}^{(2)}} = \frac{8}{3} \frac{\sigma T_m}{a L \Delta T} > 1. \quad (6)$$

Полагая $\sigma = 2 \cdot 10^{-5} \text{ J/cm}^2$, $T_m = 1683 \text{ K}$, $a \sim 10^{-7} \text{ cm}$ и $L = 1787 \text{ J/g}$, получим, что при $\Delta T < 200 \text{ K}$ наиболее вероятен двумерный механизм, поскольку работа образования критического зародыша при этом меньше. Кроме того, выбор двумерного механизма объясняется следующим обстоятельством [12]: время ожидания появления первого зародыша при плавлении монокристалла кремния при перегреве $\Delta T \sim 100 \text{ K}$ составляет 10^{-10} s для двумерного зародыша и $\sim 10^{-2} \text{ s}$ для трехмерного. Из этой оценки следует, что при воздействии на поверхность монокристалла плазменными потоками в течение $\sim 50\text{--}100 \mu\text{s}$ плавление происходит путем формирования двумерных зародышей. В случае кристаллизации при переохлаждении расплава до $\Delta T \sim 100 \text{ K}$ время ожидания возникновения первого двумерного зародыша составляет $\sim 10^{-9} \text{ s}$, а для трехмерного — $\sim 10^{-2} \text{ s}$. Поэтому за время существования жидкой фазы $\sim 100\text{--}200 \mu\text{s}$ кристаллизация расплава в результате трехмерного зародышеобразования маловероятна. Данный механизм был бы наиболее вероятен в случае существования в расплаве готовых центров кристаллизации, как происходит, например, при лазерном отжиге аморфизированного кремния [15].

Согласно теории кристаллизации, кристаллы растут по-разному в зависимости от состояния поверхности граней. Для атомарно-шероховатых поверхностей граней кристаллов характерен нормальный рост путем присоединения атомов расплава к любым точкам таких поверхностей. В результате грань растущего кристалла перемещается однородно, нормально к самой себе, и скорость роста в этом случае выражается формулой [14]

$$V(t) = a \frac{k_B T}{h_P} \exp \left(-\frac{U_a}{k_B T} \right) \left[1 - \exp \left(-\frac{L^* \Delta T}{k_B T_m T} \right) \right], \quad (7)$$

где L^* — теплота плавления на один атом.

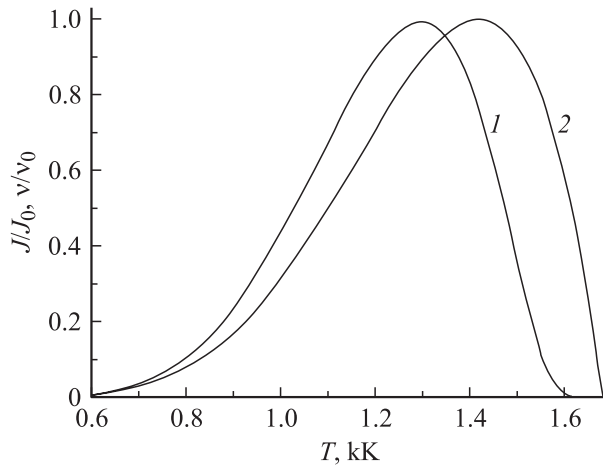


Рис. 1.

В случае атомарно-гладкой поверхности раздела фаз последовательные слои возникают через формирование двумерных зародышей (механизм послыонного роста), и в этом случае вид функции V значительно сложнее, так как определяется частотой зародышеобразования и скоростью разрастания ступени. Разрастание зародышей происходит в результате тангенциального роста, т.е. путем присоединения атомов расплава на ступенях, возникших между гранью кристалла и образовавшимися на ней двумерными зародышами со скоростью V (7). Связь между слоями определяется требованием, что центры кристаллизации очередного i -го слоя могут возникать лишь на закристаллизовавшихся участках предыдущего ($i-1$)-го слоя. Таким образом, структура поверхности кристалла имеет пирамидальный характер. Так как условия зацепления охватывают в явном виде только два последовательных слоя, то для описания процесса в данном слое достаточно знать лишь развитие процесса в предыдущем слое. Отсюда следует, что поскольку вероятность возникновения зародыша определяется не только временем, но и величиной поверхности, на которой он может возникнуть, то вводя функцию $\gamma(x, t)$ [13], учитывающую закристаллизовавшуюся долю предыдущего слоя, на которой могут возникать центры кристаллизации очередного слоя ($J(t) \rightarrow \gamma(x, t)J(t)$), можно описать процесс послыонного роста при кристаллизации полупроводника. Для функции $\gamma(x, t)$ использовалось выражение

$$\gamma(x, t) = [\psi(x + a, t) - \psi(x, t)] / \varphi(x, t), \quad (8)$$

где $\varphi(x, t)$ — доля жидкой фазы в точке x в момент времени t ; $\psi(x, t)$ — доля кристаллической фазы.

При рассмотрении плавления предполагается, что зародыши жидкой фазы могут возникать только на кристаллических участках и, следовательно, в этом случае

$$\gamma(x, t) = 1 - \varphi(x, t). \quad (9)$$

На рис. 1 показаны зависимости частоты зародышеобразования (I) для двумерного механизма зарождения

и скорости роста (2) от температуры. Видно, что непосредственно вблизи температуры плавления имеется область переохлаждения, в которой скорость зарождения практически близка к нулю. Заметное увеличение частоты зародышеобразования начинается только по достижении определенного переохлаждения. Физически это соответствует тому, что с увеличением переохлаждения ΔT расплава критический размер зародыша уменьшается и, следовательно, повышается вероятность его возникновения, так как с ростом переохлаждения существенно уменьшается работа образования зародыша.

Первый экспоненциальный множитель $\exp(-U_a/k_B T)$ в (3) и (7) соответствует вероятности перехода атомов из расплава в зародыш, т.е. пропорционален их подвижности в расплаве. При больших величинах переохлаждения частота зародышеобразования и скорость роста уменьшаются, так как с понижением температуры уменьшается скорость обмена атомами между зародышами и расплавом.

В переходной зоне, состоящей из расплава и кристалла кремния, параметры кремния аппроксимировались следующим образом [15]:

$$p(x, t) = \varphi(x, t)p_l(x, t) + [1 - \varphi(x, t)]p_s(x, t),$$

где индексы l и s относятся соответственно к жидкой и кристаллической фазам.

Уравнение (1) решались численно при следующих начальных и граничных условиях:

$$T(x, t = 0) = T_0,$$

$$k \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0} = W(t), \quad T(x \rightarrow \infty, t) = T_0.$$

При задании зависимости от времени плотности мощности теплового потока, падающего на поверхность образца, принимались в расчет следующие обстоятельства. При воздействии компрессионного плазменного потока у поверхности преграды формируется ударно-сжатый слой, существующий практически в течение всей длительности разряда и экранирующий поверхность от набегающего потока. В результате передаваемая поверхность плотность мощности после формирования такого слоя перестает расти, стабилизируясь на некотором уровне. С учетом этого форма зависимости $W(t)$ задавалась в виде трапеции

$$W(t) = W_0 \begin{cases} \frac{t}{t_0}, & t < t_0 \\ 1, & t_0 \leq t \leq t_i + t_0 \\ \frac{2t_0 + t_i - t}{t_0}, & t > t_i + t_0, \end{cases}$$

(т.е. предполагалось, что $W(t)$ за время t_0 линейно нарастает от нуля до W_0 , после чего остается постоянной в течении времени t_i , а затем линейной спадает до нуля за время t_0).

Параметры	Кристаллический Si	Расплавленный Si
ρ , g/cm ³	2.328	$2.53 - 0.152 \cdot 10^{-3}(T - T_m)$ [16]
c , J/g	$0.844 + 1.18 \cdot 10^{-4}T - 1.55 \cdot 10^{-4}T^2$ [16]	1.04
L , J/g	1787 [16]	
k , W/(cm·K)	$\frac{1521}{71.226}, T < 1200$ K [17] $\frac{8.97}{70.5}, T \geq 1200$ K	0.585 [16]
U , eV	0.42 [18]	

Значения параметров кремния, используемых при решении задачи, приведены в таблице.

Рассмотрим результаты серии расчетов с $t_i = 80 \mu\text{s}$, $t_0 = 10 \mu\text{s}$. На рис. 2 показаны временные зависимости температуры поверхности монокристаллического кремния при различных значениях плотности мощности воздействия W_0 . После того, как температура поверхности превысит температуру плавления, начинается плавление приповерхностного слоя, и формируется двухфазная переходная зона, движущаяся в глубь образца. При определении положения переднего фронта двухфазной (переходной) зоны величина φ задавалась равной 0.01, и считалось, что процесс плавления завершается, если φ достигает 0.99. После оформления двухфазной зоны температура поверхности кремния растет практически линейно с коэффициентом, зависящим от величины W_0 . После завершения участка „плато“ функции $W(t)$ рост температуры поверхности прекращается, и она начинает спадать.

Как следует из расчетов, к моменту начала плавления величина перегрева монокристалла достигает значений $\Delta T \approx 27\text{--}33$ K (рис. 3). При этом в приповерхностном слое возникают зародыши жидкой фазы, которые при указанных величинах перегрева начинают расти с высокой скоростью. Рассмотрим процесс формирования жидкой пленки более подробно на примере варианта с $W_0 = 0.8 \text{ MW/cm}^2$. На рис. 4 приведено изменение доли жидкой фазы по глубине образца в различные моменты времени. При $t = 29.1 \mu\text{s}$ доля жидкой фазы на внешней границе образца составляет около 5%. Толщина слоя, в котором $\varphi > 0.01$, начинает расти со скоростью, достигающей 10 cm/s (рис. 5). Поглощение скрытой теплоты фазового перехода в процессе роста зародышей расплава приводит к уменьшению температуры в слое расплава (рис. 6, кривые 2 и 3), перегрева на переднем фронте двухфазной зоны (рис. 3) и существенному замедлению скорости распространения переднего фронта (рис. 5). Пока передняя граница области с $\varphi > 0.01$ медленно перемещается в глубь образца, на внешней поверхности происходит увеличение доли расплава, и при $t = 30.4 \mu\text{s}$ формируется задняя граница двухфазной зоны, на которой $\varphi > 0.99$. Таким образом, на начальном этапе за время $\Delta t \leq 1.5 \mu\text{s}$ после начала плавления на поверхности образуется слой расплава толщиной $\Delta x \approx 0.03 \mu\text{m}$ с достаточно узкой переходной зоной $\Delta x \approx 0.06 \mu\text{m}$, (рис. 4).

Дальнейший рост плотности мощности в рассматриваемых режимах воздействия приводит к увеличению перегрева и скорости движения переднего фронта, которые достигают своих максимальных на данном этапе значений ($\Delta T \approx 28\text{--}32$ K и $V \approx 3\text{--}8.5$ cm/s). Ко времени

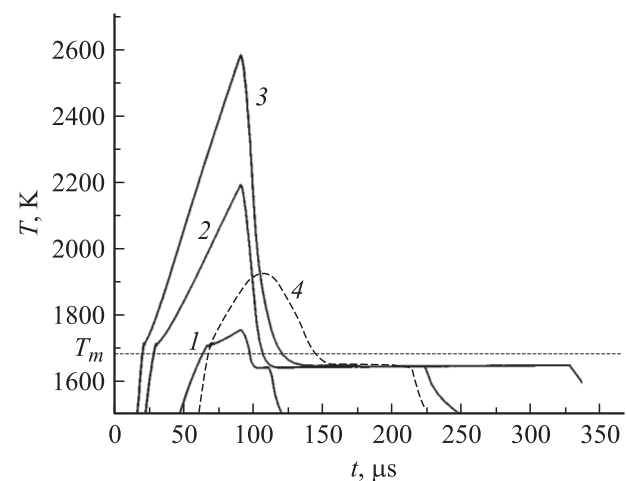


Рис. 2. Зависимость температуры поверхности кремния от времени. 1–3 — I вариант, 1 — $W_0 = 0.5$, 2 — 0.8, 3 — 1.0 MW/cm^2 , 4 — II вариант, $W(t) = W_0 \sin^2(\pi t/2t_i)$, $W_0 = 0.8 \text{ MW/cm}^2$.

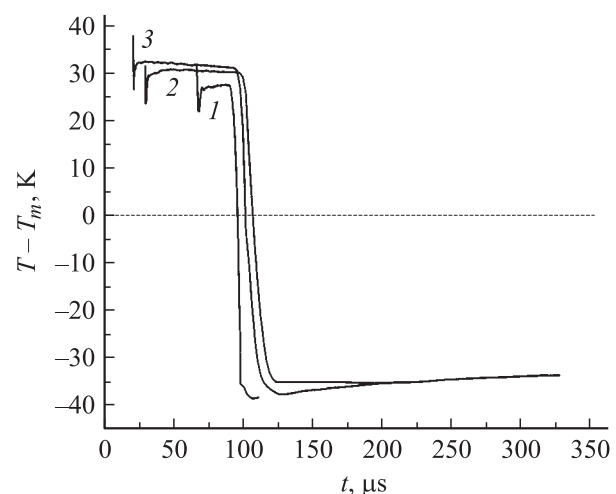


Рис. 3. Зависимость перегрева (переохлаждения) на границе раздела фаз от времени. 1–3 — I вариант, 1 — $W_0 = 0.5$; 2 — 0.8, 3 — 1.0 MW/cm^2 .

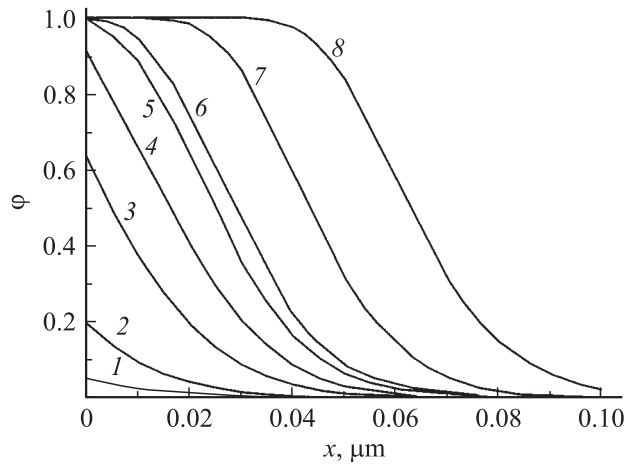


Рис. 4. I вариант, $W_0 = 0.8 \text{ MW/cm}^2$ (t , μs : 29.1 (1), 29.3 (2), 29.6 (3), 29.9 (4), 30.2 (5), 30.4 (6), 31.0 (7) и 31.7 (8)).

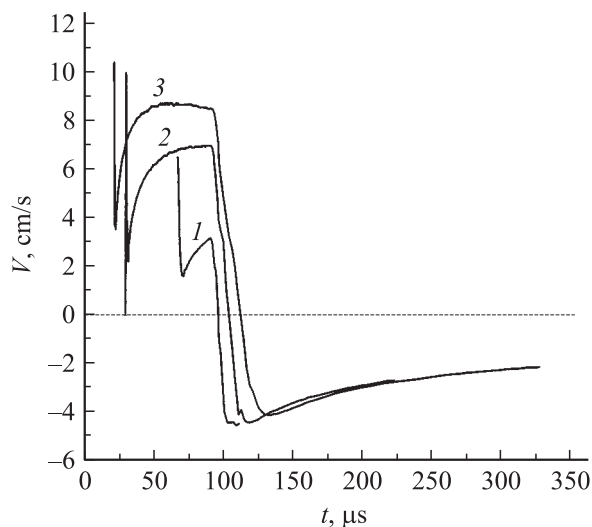


Рис. 5. Зависимость скорости движения границы раздела от времени. 1 — $W_0 = 0.5$, 2 — 0.8 , 3 — 1.0 MW/cm^2 .

окончания воздействия плазменного потока (в данной серии расчетов $W = 0$ при $t \geq 100 \mu\text{s}$) распространение зоны расплава в глубь полупроводника замедляется. При этом в результате отвода тепла в объем образца, который уже не компенсируется энерговыделением плазменного потока, перегрев полностью снимается, и расплав переохлаждается в районе переходной зоны до $\Delta T \approx 35\text{--}40 \text{ K}$ (рис. 3). При переохлаждении начинается формирование и рост зародышей кристаллической фазы. Скорость движения границы зоны $\varphi > 0.99$ на начальном этапе кристаллизации достигает значений $\approx 4 \text{ cm/s}$. В процессе дальнейшей кристаллизации происходит небольшое увеличение температуры в жидком слое (на $3\text{--}5 \text{ K}$) и уменьшение скорости движения границ раздела фаз до $\approx 2 \text{ cm/s}$ (рис. 5). В рассматриваемой серии расчетов через 120 , 225 и $325 \mu\text{s}$ (для W_0 соответственно 0.5 ; 0.8 и 1.0 W/cm^2) после начала воздействия расплав полностью кристаллизуется. При этом

максимальная глубина проплавления достигает $6.5 \mu\text{m}$ (рис. 7). При минимальной из рассмотренных вариантов величине $W_0 = 0.5 \text{ MW/cm}^2$ для импульсов трапецидальной формы максимальная глубина проплавления составляет менее $1 \mu\text{m}$, что сопоставимо с характерными величинами периода объемных структур, формирующихся на поверхности монокристаллического кремния [1–3].

Естественно, что при фиксированной величине длительности импульса существенное значение может играть и форма импульса в целом. Расчеты, однако, показали, что при изменении формы импульса с сохранением общей продолжительности и максимальной интенсивности воздействия временные характеристики плавления и кристаллизации не претерпевают существенных измене-

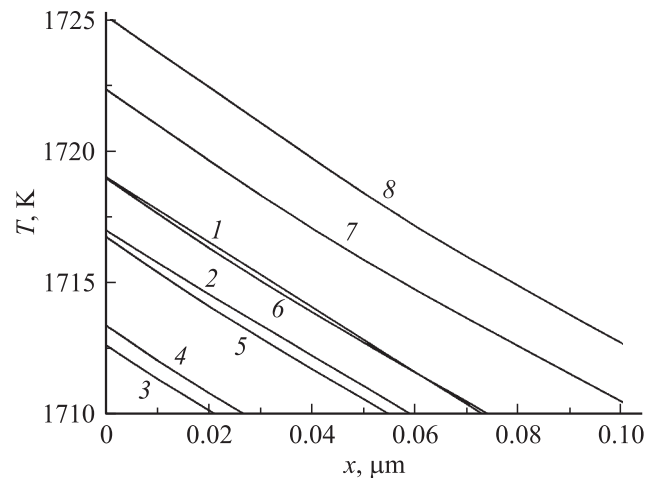


Рис. 6. Расчетные профили температуры в различные моменты времени (t , μs : 29.1 (1), 29.3 (2), 29.6 (3), 29.9 (4), 30.2 (5), 30.4 (6), 31.0 (7) и 31.7 (8)).

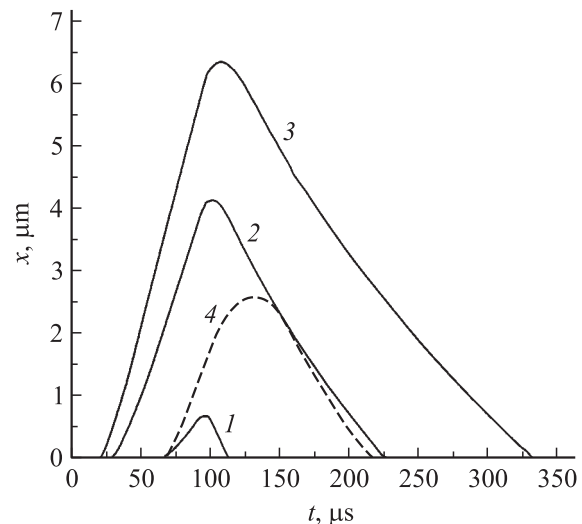


Рис. 7. Зависимость глубины распространения расплава от времени. 1–3 — I вариант, 1 — $W_0 = 0.5$, 2 — 0.8 , 3 — 1.0 MW/cm^2 , 4 — II вариант, $W(t) = W_0 \sin^2(\pi t/2t_i)$, $W_0 = 0.8 \text{ MW/cm}^2$.

ний. В частности, на рис. 2 и 7 приведены результаты моделирования и для импульса с $W(t) = W_0 \sin^2(\pi t/2t_0)$.

Наблюдаемые при воздействии на монокристаллический кремний компрессионными плазменными потоками регулярные поверхностные структуры чаще всего имеют вид цилиндров или образуют гофр. Уже в первых публикациях [1–3] указывалось, что возникновение структур цилиндрического вида может быть связано с развитием вызывающих ячеечное движение конвективных неустойчивостей и быстрым охлаждением. Полученные данные по численному моделированию позволяют оценить, выполняются ли условия реализации различных механизмов появления данных образований на поверхности кремния в рассматриваемых условиях.

В работах [6,19] описана возможность возбуждения конвективного ячеечного движения в жидком полупроводнике в результате развития неустойчивости под действием термоэлектрической силы. Происходит это следующим образом. При наличии в слое толщиной h градиента температуры ∇T , вызываемого в наших условиях воздействием компрессионного плазменного потока, в жидком кремнии возникает электрическое поле $E = \gamma_E \nabla T$ (γ_E — коэффициент термоэдс), и появляется связанный с полем заряд. Сила воздействия на этот заряд способна вызывать движение, если ее величина оказывается достаточной для преодоления сил диссипации и возможных стабилизирующих факторов. Кроме термоэлектрической силы в жидком кремнии действуют также сила плавучести и термокапиллярная сила. Все эти силы можно охарактеризовать безразмерными числами. Термоэлектрический механизм возбуждения конвективного ячеечного движения характеризуется безразмерным „термоэлектрическим“ числом [6]

$$E = \frac{\varepsilon \gamma_E^2 (\nabla T)^2 h^2}{\rho \nu \kappa},$$

где ε — диэлектрическая проницаемость, ν — коэффициент кинематической вязкости, κ — коэффициент температуропроводности. Это число показывает, во сколько раз вызывающая неустойчивость термоэлектрическая сила превышает силы диссипации. Сила плавучести зависит от коэффициента объемного расширения жидкости β и характеризуется числом Релея:

$$Ra = \frac{\beta g \nabla T h^2}{\nu \kappa}.$$

Действие термокапиллярных сил определяется коэффициентом термокапиллярности σ_k (температурной зависимостью коэффициента поверхностного натяжения α , $\sigma_k = -\partial\alpha/\partial T$) и характеризуется числом Марангони [6]:

$$M = \frac{\sigma_k \nabla T h^2}{\rho \nu \kappa}.$$

Величины указанных безразмерных чисел определяют относительную роль рассматриваемых сил. Для расплава кремния при температуре плавления $\varepsilon =$

$= 10^{-10} - 10^{-9}$ F/m [19], $\gamma_E = 6$ mV/K [20], $\eta = \rho \nu = 7.75 \cdot 10^{-4}$ Ns/m² [21]. Разность температур в слое расплава, согласно результатам расчетов, достигает около 1500 К. По данным [22], поверхностное натяжение жидкого кремния составляет $\alpha = 733 - 0.062(T - 1687)$ mN/m. Согласно [23], коэффициент теплового расширения жидкого кремния равен $\beta = 1.4 \cdot 10^{-4}$ /K. С учетом указанных теплофизических параметров получаем, что $E = 6 \div 60$, т.е. возбуждение неустойчивости, приводящей к конвективному ячеечному движению под действием термоэлектрического эффекта в рассматриваемых условиях, действительно возможно. С другой стороны, оценки числа Релея показывают, что действие силы плавучести проявляется лишь в очень толстых слоях расплава, которые не возникают в рассматриваемых условиях. Термокапиллярный эффект может проявляться лишь при наличии свободной поверхности. В нашем случае нагрев осуществляется со стороны свободной поверхности. При этом термокапиллярная сила действует против силы, вызываемой термоэлектрическим эффектом и направленной внутрь слоя кремния, тем самым стабилизируя конвекцию. Но в очень тонких слоях расплава термоэлектрический эффект преобладает. При увеличении толщины слоя h возрастает влияние термокапиллярной силы, подавляющей конвекцию, вызываемую термоэлектрической силой. Путем сравнения безразмерных чисел, характеризующих воздействие термоэлектрической и термокапиллярной силы (как это сделано, например, в [24]), можно найти характерную глубину расплава, при которой влияние эффектов сопоставимо:

$$h_c = \left(\frac{\rho \kappa \nu \varepsilon \gamma_E^2}{\sigma_k^2} \right)^{1/2} \frac{\nabla T_{\perp}}{\nabla T_{\parallel}},$$

где ∇T_{\perp} — градиент температуры поперек слоя расплава, а ∇T_{\parallel} — вдоль слоя. Таким образом, если градиент имеет только поперечную составляющую, то термокапиллярная неустойчивость вообще не может подавить термоэлектрическую. В нашем случае нагрев имеет только перпендикулярную составляющую, но при определенных условиях может появиться и продольная компонента. Так, при развитии термокапиллярной неустойчивости даже при чисто поперечном нагреве возникает деформация свободной поверхности, и в результате появляется продольная компонента градиента температуры (см., например, [25]). Однако и в этом случае $\nabla T_{\parallel} \leq \nabla T_{\perp}$, т.е. минимальная толщина, на которой может проявиться подавление термоэлектрической неустойчивости за счет термокапиллярного эффекта, составляет в наших условиях $0.4 \div 1.4 \mu\text{m}$, что несколько превышает максимальные диаметры периодических структур, наблюдаемых в эксперименте.

Как отмечается в [19], рассмотренные выше силы могут быть ответственны и за возбуждение в жидких полупроводниках поверхностных волн. Возбуждение волн происходит в случае, когда нагрев, т.е. градиент темпе-

ратуры, превышает определенное минимальное значение

$$A_{\min} = \left(\frac{4\alpha\rho g}{\gamma_E^4 \varepsilon^2} \right)^{1/4}.$$

Подставляя в эту формулу теплофизические данные для наших условий, получаем $A_{\min} = (2.4 \div 7.7) \cdot 10^7$ K/m. В результате численного моделирования получено (см., например, результаты расчетов на рис. 6), что $A \approx 1.2 \cdot 10^8$ K/m, т.е. скорость нагрева в рассматриваемых условиях достаточна для возникновения поверхностных волн.

Таким образом, рассмотренные эффекты могут приводить к формированию регулярных поверхностных структур обоих наблюдаемых в экспериментах видов, как ячеистого типа, так и в виде гофра.

Список литературы

- [1] Углов В.В., Анищик В.М., Асташинский В.В. и др. // Письма в ЖЭТФ. 2001. Т. 74. Вып. 4. С7 234–236.
- [2] Асташинский В.М., Ананин С.И., Аскерко В.В. и др. // Вакуумная техника и технология. 2002. Т. 12. № 2. С. 91–94.
- [3] Astashynski V.M., Ananin S.I., Askerko V.V. et al. // Compression Plasma Flows Action on Monocrystalline Silicon Surface. 29 EPS Conference on Plasma Physics and Control Fusion. 17–21 June 2002. Montreux, Switzerland. P2.027. P. 1–4.
- [4] Morozov A.I. // Nuclear Fusion Special Suppl. 1969. P. 111–119.
- [5] Ананин С.И., Асташинский В.М., Баканович Г.И. и др. // Физика плазмы. 1990. Т. 16. № 2. С. 186–196.
- [6] Эйдельман Е.Д. // УФН. 1995. Т. 165. № 11. С. 1279–1294.
- [7] Карпов С.Ю., Ковальчук Ю.В., Погорельский Ю.В. // ФТП. 1986. Т. 20. № 11. С. 1945–1969.
- [8] Černý R., Šášík R., Lukeš I., Cháb V. // Phys. Rev. B. 1991. Vol. 44, N 9. P. 4097–4102.
- [9] Чернов А.А., Гиваргизов Е.И., Багдасаров Х.С. и др. Современная кристаллография. Т. 3. М.: Наука, 1980. 408 с.
- [10] Жвавый С.П. // ЖТФ. 2000. Т. 70. Вып. 8. С. 58–62.
- [11] Углов В.В., Анищик В.М., Асташинский В.В. и др. // Тр. XII междунар. совещ. „Радиационная физика твердого тела“. М. Изд-во НИИ ПМТ. 2002. С. 16–21.
- [12] Александров Л.Н. Кинетика кристаллизации и перекристаллизации полупроводниковых пленок. Новосибирск: Наука, 1985. 224 с.
- [13] Беленький В.З. Геометрико-вероятностные модели кристаллизации. М.: Наука, 1989. 88 с.
- [14] Скрипов В.П., Коверда В.П. Спонтанная кристаллизация переохлажденных жидкостей. М.: Наука, 1984. 232 с.
- [15] Жвавый С.П. // ЖПС. 1989. Т. 50. № 4. С. 589–595.
- [16] Регель А.Р., Глазов В.М. Физические свойства электронных расплавов. М.: Наука, 1980. 296 с.
- [17] Bell A.E. // RCA Review. 1979. Vol. 40. N 3. P. 295–338.
- [18] Peter M.R. // Phys. Rev. B. 1988. Vol. 38. N 4. P. 2727–2739.
- [19] Эйдельман Е.Д. // ТВТ. 1994. Т. 32. С. 418–426.
- [20] Полухин В.А., Аликина Е.В. // Известия Челябинского Научного Центра. Вып. 1. 2000. С. 11–16.
- [21] Vizman D., Gräbner O., Müller G. // Journal of Crystal Growth. 2001. Vol. 233. P. 687–698.
- [22] Fujii H., Shirali A., Kohno K. et al. // Surface Tension of Liquid Silicon, Spacebound 2000, May 14–17, 2000, Vancouver, Canada.
- [23] Langen M., Hibiya T., Eguchi M. et al. // Journal of Crystal Growth. 1998. Vol. 186. P. 550–556.
- [24] Эйдельман Е.Д. // ФТП. 1994. Т. 28. С. 1535–1543.
- [25] Бирих Р.В., Рудаков Р.Н. // Механика жидкости и газа. 1996. № 5. С. 30–36.