

УДК 539.219.621

DOI: 10.32326/1814-9146-2023-85-3-426-436

РОЛЬ УПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ ПРИ ТЕРМОМИГРАЦИИ ЖИДКИХ ЗОН НА ОСНОВЕ АЛЮМИНИЯ В КРЕМНИИ*

© 2023 г. Широков В.Б.^{1,2}, Середин Б.М.³,
Тимошенко П.Е.², Калинин В.В.¹, Попов В.П.³

¹Южный научный центр РАН, Ростов-на-Дону, Российская Федерация

²Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Российская Федерация

³Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ)
имени М.И. Платова, Новочеркасск, Российская Федерация

vkalin415@mail.ru

Поступила в редакцию 01.08.2023

Метод термомиграции жидких зон на основе алюминия позволяет создавать в монокристаллических пластинах кремния сложные структуры замкнутых каналов с границами, сформированными из *p-n* переходов. Каналы характеризуются однородностью свойств, *p-n* переходы – своей резкостью. Такие структуры используются в сильноточной электронике, фотовольтаике, микроэлектромеханических преобразователях. Объемная деформация внутри и вне канала вследствие легирования кремния алюминием приводит образованию механических напряжений. Равновесная форма образующихся при высоких температурах каналов определяется минимумом упругой энергии и зависит от материальных параметров и геометрии структуры. В рамках линейной теории упругости исследовано поведение упругой энергии при формировании структуры термомиграционных каналов, легированных алюминием в монокристаллическом диске (001) среза, при высокой температуре. Моделирование выполнено методом конечных элементов в математическом пакете COMSOL Multiphysics. Исследование проведено для практически важных структур, в которых направление ребер ориентировано вдоль диагонали квадрата. Только такие структуры в процессе термомиграции не имеют разрывов. По результатам расчетов выявлено, что минимуму упругой энергии соответствуют структуры с различной кристаллической ориентацией внутри канала и вне его – в основной матрице кремния. Направление кристаллических осей внутри канала, отвечающее минимуму упругой энергии, повернуто на 45° в плоскости диска относительно направления осей основной матрицы кристалла кремния. Кроме того, расчеты показали, что при таком развороте форма каналов изменяется. Минимуму упругой энергии соответствуют не вертикальные, а наклонные структуры. Угол наклона пирамид зависит от ширины каналов и расстояния между ними.

Ключевые слова: термомиграция, градиент температуры, жидкая зона, упругая энергия.

* Выполнено при поддержке Минобрнауки России в рамках госзадания ЮРГПУ (НПИ) имени М.И. Платова (проект FENN-2023-0005).

Введение

Зонная перекристаллизация градиентом температуры или термомиграция (ТМ) – процесс, при котором жидкая зона в виде капли, сетки или протяженных участков мигрирует в твердом теле в направлении градиента температуры [1, 2]. ТМ жидкой зоны представляет собой растворение твердого вещества на горячей стороне зоны, диффузию растворенных атомов твердого тела через жидкую зону и кристаллизацию растворенных атомов твердого вещества на холодной стороне зоны. При прохождении зоны происходит легирование. Скорость термомиграционного легирования примерно на четыре порядка выше скорости твердотельной диффузии. Метод ТМ используется в микроэлектронике для формирования глубоко легированных областей, проводящих каналов, изолирующих областей, для создания монокристаллических соединений полупроводников [3–6]. В кремнии термомиграция используется для создания p - n переходов при прохождении зоны раствора-расплава на основе алюминия через кремний n -типа [2, 7–14].

В результате ТМ образуются каналы p -типа, ограниченные стенками, представляющие собой области p - n переходов, в которых действуют механические напряжения, вызванные различием объемной деформации внутри и вне канала вследствие легирования. Форма и геометрия образованных каналов зависят от большого количества параметров, среди которых определяющими являются ориентация подложки, температура подложки, градиент температуры и его направление, ширина канала, расстояние между ними [12, 14–18]. Температура и ее градиент определяют в основном скорость ТМ. Полученные структуры каналов должны соответствовать термодинамическому равновесию для данной температуры. Основным вклад в термодинамический потенциал вносит упругая энергия. В настоящей статье приведены расчеты и проанализировано влияние упругих механических напряжений на структуру термомиграционных каналов в пластине кремния с ориентацией (001). Моделирование выполнено методом конечных элементов в пакете COMSOL Multiphysics.

Термомиграционный канал

Формирование канала, легированного алюминием, в монокристаллическом диске (001) среза толщиной 0,5 мм было выполнено методом ТМ при температуре 1200 °С в вакууме не хуже 10^{-4} мм рт. ст. в течение двух часов. Для визуализации каналов обе поверхности пластины подверглись шлифовке, полировке и травлению. На рис. 1 приведены типичные фотографии прямолинейного канала в пластине кремния: вид стартовой поверхности, обращенной к холодильнику (a); вид финишной поверхности, обращенной к нагревателю (b); вид торцевого разреза ($в$).

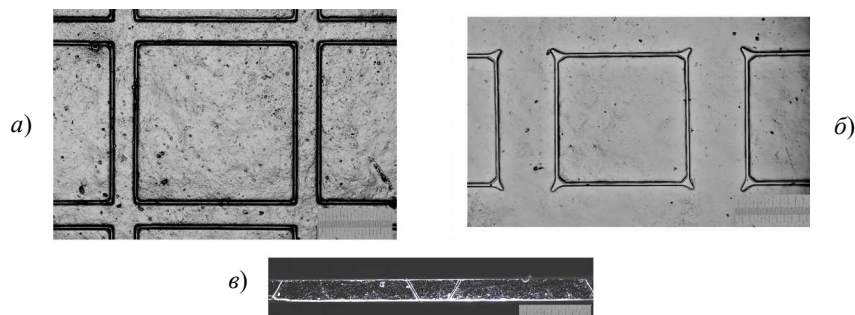


Рис. 1. Виды травленной поверхности шлифов пластины кремния в ориентации (100)

На рис. 2 представлена топография поверхности диска кремния в области канала, измеренная при помощи атомо-силового микроскопа INTEGRA, НТ-МДТ. На рисунке внутренняя область канала углублена, так как скорость травления p^+ области максимальна. Стенки каналов соответствуют, очевидно, p - n переходам.

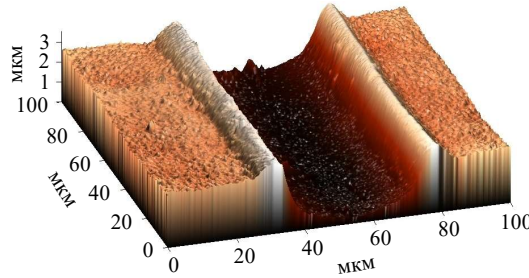


Рис. 2. Топографии 3D канала на холодной (стартовой) стороне

Влияние упругих напряжений

Легирование кремния алюминием приводит к увеличению параметра решетки кремния, то есть к объемной деформации кристалла. Согласно [19], в канале появляется деформация $\sim 10^{-5}$. Легированный канал Si_{Al} встроен в матрицу недеформированного кремния Si . На границе $\text{Si}_{\text{Al}}\text{-Si}$ возникает в соответствии с граничными условиями переходная область, согласующая упругие изменения кристаллических состояний Si_{Al} и Si . Метод легирования кремния с помощью ТМ дает концентрацию алюминия, близкую к 10^{19} см^{-3} [2, 19]. Это соответствует атомной концентрации порядка десятых долей процента, что не приводит к изменению симметрии и существенному изменению упругих постоянных.

Объемная деформация легированных областей приводит к появлению переходной области – границы, деформации в которой вносят вклад в полную упругую энергию системы. Плотность упругой энергии кубического кристалла в обозначениях Фойгта такова:

$$F = \frac{1}{2}c_{11}(e_1^2 + e_2^2 + e_3^2) + \frac{1}{2}c_{44}(e_4^2 + e_5^2 + e_6^2) + c_{12}(e_1e_2 + e_1e_3 + e_2e_3), \quad (1)$$

где c_{11} , c_{12} , c_{44} – упругие модули; деформации e_i определяются выражением:

$$e_i = \frac{\partial u_i}{\partial x_i}, \quad i = 1, 2, 3,$$

$$e_4 = \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right), \quad e_5 = \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right), \quad e_6 = \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right).$$

Здесь u_i – смещения вдоль координат x_i .

Уравнения закона Гука

$$t_i = \frac{\partial F}{\partial e_i} \quad (2)$$

определяют напряжения t_i :

$$t_i = \sigma_{ii}, \quad i = 1, 2, 3,$$

$$t_4 = \sigma_{23}, \quad t_5 = \sigma_{13}, \quad t_6 = \sigma_{12}. \quad (3)$$

Для решения стационарной задачи теории упругости используются уравнения (2) при отсутствии сил на внешних границах. На границе канала с кристаллом действуют условия равенства смещений и сил.

Рассмотрим влияние ориентации прямолинейного канала на полную упругую энергию $W = \int_V FdV$ системы $\text{Si}_{\text{Al}}-\text{Si}$ объемом V . Введем угол между осью $\langle 100 \rangle$ и направлением канала в плоскости диска кремния согласно рис. 3.

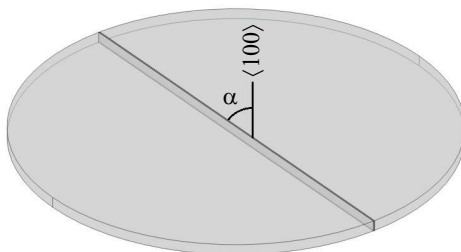


Рис. 3. Ориентация канала Si_{Al} внутри диска кремния

Будем считать, что направление канала при начальном угле $\alpha = 0$ совпадает с осью $\langle 100 \rangle$. При изменении угла α канал поворачивается на соответствующий угол. Если перейти в систему отсчета, связанную с каналом, то это будет эквивалентно повороту кристаллической матрицы на угол $-\alpha$ относительно неподвижного канала. Этот угол в дальнейшем будем обозначать как α_{Si} . В силу кубической симметрии достаточно рассмотреть повороты на углы от нуля до 45° . Упругая энергия W диска Si в случае отсутствия канала при повороте кристаллических осей меняться не будет. Однако полная упругая энергия W системы $\text{Si}_{\text{Al}}-\text{Si}$ будет меняться. Исследуем угловую зависимость полной упругой энергии W системы канал–диск численно методом конечных разностей с использованием математического пакета COMSOL Multiphysics. Будем считать, что процесс образования каналов (ТМ) происходит при температуре 1200°C . Упругие модули в упругой задаче для этой температуры определим из результатов температурных измерений модулей Юнга для различных направлений согласно рекомендациям, приведенным в [20]. Упругие модули составили: $c_{11} = 147$ ГПа, $c_{12} = 57$ ГПа, $c_{44} = 70$ ГПа.

По результатам расчета угловая зависимость полной упругой энергии системы канал–диск кремния (001) среза имеет минимум при $\alpha_{\text{Si}} = 0$, то есть при совпадении направления канала и тетрагональной оси матрицы кристалла.

В эксперименте [7, 8] термомиграцией алюминия сформированы каналы, легированные алюминием, вдоль различных направлений в диске монокристаллического кремния (001) среза. Здесь каналы изменяли свою форму вплоть до разрыва на отдельные части, имеющие характерную форму фасет, во всех направлениях, кроме направления $\langle 110 \rangle$ ($\alpha_{\text{Si}} = 45^\circ$). Это согласуется с расчетом. Действительно, скорость ТМ связана с образованием границ каналов. Поэтому скорость ТМ вдоль направлений тетрагональных осей будет выше, поскольку это направление отвечает минимуму упругой энергии. Следовательно, затраты энергии на образование границ меньше, чем вдоль $\langle 110 \rangle$, что не будет приводить к разрыву каналов в плоскости вдоль направления $\langle 110 \rangle$. На практике только направление $\langle 110 \rangle$ используется для формирования структур ТМ алюминия в диске (001) среза.

Рассмотрим более детально особенности формирования канала. При ТМ канал отделен от основной матрицы жидкой зоной и его границами. При формировании канала, особенно в начальный момент, отсутствует жесткая структурная связь между каналом и кристаллом кремния. Образование канала сопровождается появлением упругих напряжений. Упругая энергия, связанная с изменением объема, изотропна. Дополнительная упругая энергия, обусловленная появлением границы канал – основная матрица, может приводить к ориентационным изменениям формирующейся кристаллической структуры внутри канала. Зафиксируем ориентацию кристаллической матрицы кремния и направление канала при $\alpha_{Si} = 45^\circ$, что соответствует реально формируемым на практике устойчивым каналам. Будем менять кристаллическую ориентацию Si_{Al} внутри канала, характеризуемую углом α , в то время как ориентация основной матрицы кристалла Si фиксирована при угле $\alpha_{Si} = 45^\circ$. Результаты численного расчета угловой зависимости упругой энергии, связанной с направлением кристалла внутри канала относительно матрицы кристалла, приведены на рис. 4 (кривая Line – для линейного канала; кривая Square – для квадратного канала; ориентация матрицы диска фиксирована, $\alpha_{Si} = 45^\circ$). Как следует из рисунка, при ориентации кристалла внутри канала вдоль кубической оси ($\alpha = 0$) упругая энергия минимальна и максимальна при соосной ориентации осей кристалла внутри канала ($\alpha = 45^\circ$) и осей кристаллической матрицы кремния ($\alpha_{Si} = 45^\circ$). Таким образом, минимуму упругой энергии системы диск–канал соответствует состояние, при котором кристалл внутри канала развернут в плоскости диска на 45° относительно направления канала, ориентированного вдоль направления $\langle 110 \rangle$ кристаллической матрицы диска.

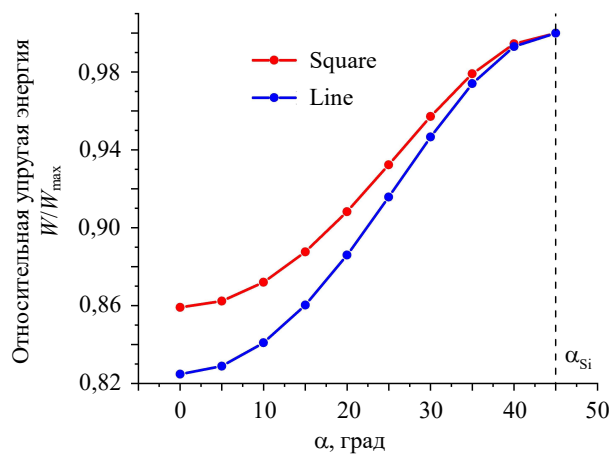


Рис. 4. Зависимость упругой энергии системы Si_{Al} канал–диск кремния (001) среза относительно угла поворота кристалла внутри канала

Выше был рассмотрен прямой канал. Практически важными являются структуры со сложной формой каналов. Изгиб канала приводит к формированию угловой области, где упругая энергия будет отличаться от упругой энергии прямолинейной области. Если геометрически прямолинейная часть каналов будет преобладать, то полученные выше результаты качественно не должны измениться. Рассмотрим структуру, образованную замкнутыми каналами в виде прямоугольника, расположенного на плоскости (001) и ориентированного ортогонально плоскости (рис. 5). Считаем,

что их бесконечно много, то есть такие структуры занимают всю плоскость. Математически это означает, что такая структура имеет одинаковые периоды вдоль ребер прямоугольника в плоскости (x, y) .

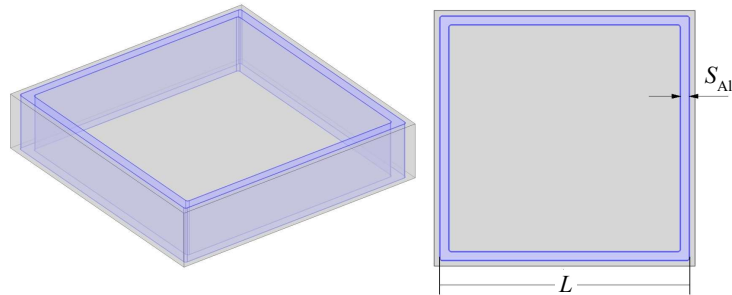


Рис. 5. Вид структуры прямоугольных каналов

Период структуры на рис. 5 равен $L + a$, где L – сторона квадрата, образованного замкнутыми каналами; a – расстояние между квадратами; S_{A1} – ширина канала. Канал выделен синим цветом, а кристаллическая матрица кремния (001) среза – серым. Считаем, что сторона канала (квадрата) ориентирована в плоскости вдоль направлений $\langle 110 \rangle$ ($\alpha_{Si} = 45^\circ$). Численный расчет полной упругой энергии W в зависимости от ориентации кристалла внутри канала приведен на рис. 4 (линия Square). Как видно из рисунка, результат такой же, как и для прямого канала – минимуму упругой энергии соответствует ориентация осей кристалла внутри канала, развернутая на 45° относительно осей основной матрицы. Расчет выполнен для $L = 2,2$ мм, $a = 100$ мкм, $S_{A1} = 80$ мкм. Следует отметить, что результаты расчета для одиночной структуры вида, представленного на рис. 5, на круглом диске качественно не отличаются от полученных для периодической системы.

Процесс ТМ может приводить не только к формированию каналов, ортогональных поверхности диска. Начальный размер квадрата может уменьшиться, как это следует из экспериментальных результатов. Прямоугольная форма может превратиться в пирамидальную. Рассмотрим каналы пирамидальной формы, как показано на рис. 6, и вычислим, как при этом изменяется упругая энергия такой структуры.

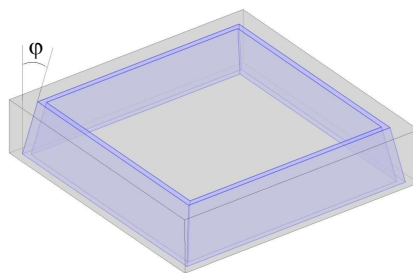


Рис. 6. Вид структуры каналов пирамидальной формы

Введем угол наклона ϕ пирамидальной структуры каналов (см. рис. 6) относительно нормали к плоскости пластины. Результаты расчета зависимости упругой энергии от этого угла при $L = 2,2$ мм, $a = 150$ мкм, $S_{A1} = 50$ мкм приведены на рис. 7. Минимум упругой энергии наблюдается не при нулевом угле ϕ , а при 15° . Поэтому равновесная форма каналов при минимальной упругой энергии соответствует пирамидальной форме с углом при вершине пирамиды, равным 15° .

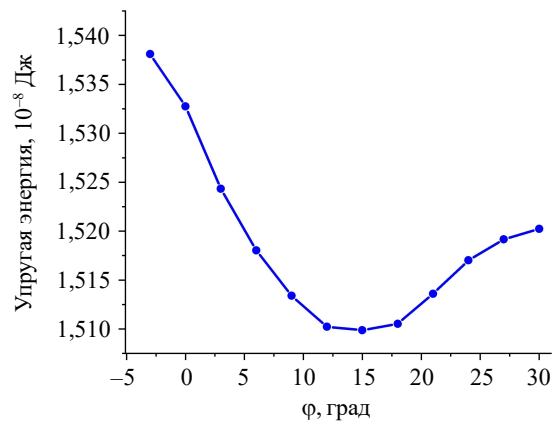


Рис. 7. Зависимость упругой энергии относительно угла наклона пирамиды

Упругая энергия как функция угла пирамиды может не иметь минимума. Пример приведен на рис. 8 для $L = 2,2$ мм, $a = 250$ мкм, $S_{A1} = 80$ мкм. Если считать, что система будет стремиться к минимуму упругой энергии, направление каналов при ТМ будет непрерывно меняться. Канал будет формироваться изогнутый, и, в конце концов, может образоваться такое направление, вдоль которого каналы станут разрываться.

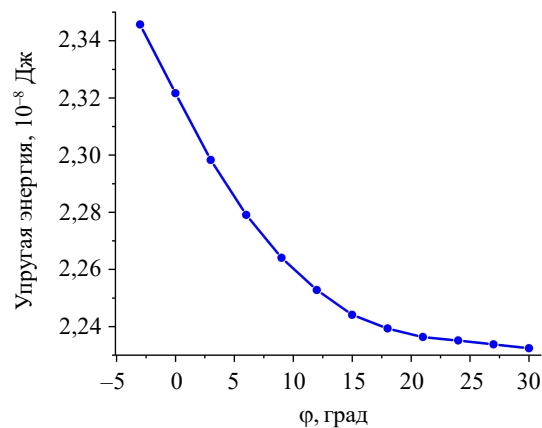


Рис. 8. Зависимость упругой энергии относительно угла наклона пирамиды

Для нахождения оптимальных параметров каналов и угла наклона пирамиды, при которых существует минимум упругой энергии, численно выполнены расчеты для размера исходного квадрата $L = 2$ мм. Результаты приведены на рис. 9. Здесь каждая точка означает, что для параметров (координат) точки a , S_{A1} существует значение угла ϕ , при котором достигается минимум упругой энергии.

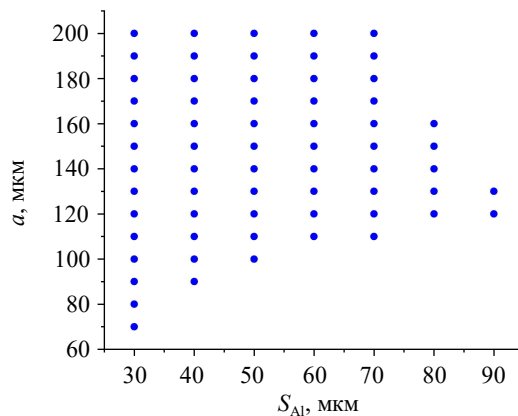


Рис. 9. Параметры S_{A1} и a , при которых существует минимум упругой энергии для квадратного канала размером $L = 2$ мм

Обсуждение результатов и выводы

Легированная часть кристалла кремния имеет увеличенный по сравнению с исходным объем, что приводит к деформациям в области на границе с исходным кристаллом. Плотность упругой энергии в кристалле как в исходной, так и в легированных частях изотропна – не зависит от направления. Однако упругая энергия в пограничной области обладает анизотропными свойствами в силу граничных условий. Как следует из расчетов, для монокристаллического диска кремния (001) среза упругая энергия границы максимальна при соосном расположении кристалла внутри канала и вне его. Минимум упругой энергии достигается при развороте кристалла внутри канала на 45° в плоскости диска по отношению к недопированной части диска. Разворот кристалла должен происходить в начальной стадии образования канала. Сначала происходит контактное плавление кремния, насыщение расплавленного алюминия кремнием при заданной температуре, согласно фазовой диаграмме. За счет градиента температуры первые кристаллиты будут образовываться в верхней части жидкой капли. Ориентация кристаллитов, очевидно, определяется формированием боковой границы с основным кристаллом. Из расчетов следует, что граница будет приводить к развороту кристаллитов на 45° . После формирования кристаллического слоя канала ориентация при дальнейшей кристаллизации будет определяться и этим слоем.

Равновесные состояния системы каналов определяются минимумом упругой энергии. Система квадратных вертикальных сквозных каналов на диске кремния (001) среза не отвечает минимуму энергии. В этом случае минимуму упругой энергии отвечает система каналов в виде пирамид с зависящим от размеров каналов и расстояния между ними углом наклона их боковых граней. При этом ориентация кристаллических осей внутри канала повернута на 45° относительно основной матрицы кристаллического диска.

Список литературы

1. Pfann W.G. *Zone Melting*. New York: John Wiley & Sons, 1966. 310 p.
2. Лозовский В.Н., Лунин Л.С., Попов В.П. *Зонная перекристаллизация градиентом температуры полупроводниковых материалов*. М.: Металлургия, 1987. 232 с.

3. Лозовский В.Н., Лунин Л.С., Благин А.В. *Градиентная жидкофазная кристаллизация многокомпонентных полупроводниковых материалов*. Ростов-на-Дону: Изд-во СКНЦ ВШ, 2003. 376 с.
4. Лозовский В.Н., Лунин Л.С. *Пятикомпонентные твердые растворы соединений АІІІВ: (Новые материалы оптоэлектроники)*. Ростов-на-Дону: Изд-во Ростовского университета, 1992. 193 с.
5. Бучин Э.Ю., Денисенко Ю.И. Использование процессов термомиграции в технологии МЭМС. *Нано- и микросистемная техника*. 2005. №9. С. 29–34.
6. Eslamian M., Saghir M.Z. Thermomigration applications in MEMS, NEMS and solar cell fabrication by thermal metal doping of semiconductors. *Fluid Dynamics and Materials Processing*. 2012. Vol. 8. No 4. P. 353–380. DOI: 10.3970/fdmp.2012.008.353.
7. Лозовский В.Н., Попов В.П. О стабильности фронта роста при кристаллизации методом движущегося растворителя. *Кристаллография*. 1970. Т. 15. Вып. 1. С. 149–155.
8. Cline H.E., Anthony T.R. Thermomigration of aluminum rich liquid wires through silicon. *Journal of Applied Physics*. 1976. Vol. 47. Iss. 6. P. 2332–2336. DOI: 10.1063/1.323009.
9. Anthony T.R., Boah J.K., Chang M.F., Cline H.E. Thermomigration processing of isolation grids in power structures. *IEEE Transactions on Electron Devices*. 1976. Vol. 23. Iss. 8. P. 818–823. DOI: 10.1109/T-ED.1976.18492.
10. Cline H.E., Anthony T.R. High speed droplet migration silicon. *Journal of Applied Physics*. 1976. Vol. 47. Iss. 6. P. 2325–2331. DOI: 10.1063/1.323008.
11. Cline H.E., Anthony T.R. On the thermomigration of liquid wires. *Journal of Applied Physics*. 1978. Vol. 49. Iss. 5. P. 2777–2786. DOI: 10.1063/1.325157.
12. Cline H.E., Anthony T.R. Migration on fine molten wires in thin silicon wafers. *Journal of Applied Physics*. 1978. Vol. 49. Iss. 4. P. 2412–2419. DOI: 10.1063/1.325082.
13. Chang M., Kennedy R. The application of temperature gradient zone melting to silicon wafer processing. *Journal of the Electrochemical Society*. 1981. Vol. 128. No 10. P. 2193–2198. DOI: 10.1149/1.2127216.
14. Morillon B., Dilhac J.-M., Ganibal C., Anceau C. Study of aluminum thermomigration as a low thermal budget technique for innovative power devices. *Microelectronics Reliability*. 2003. Vol. 43. Iss. 4. P. 565–569. DOI: 10.1016/S0026-2714(03)00025-8.
15. Morillon B. Etude de la thermomigration de l'aluminium dans le silicium pour la réalisation industrielle de murs d'isolation dans les composants de puissance bidirectionnels. *Theses*. INSA Toulouse. 2002. 222 p. (Le Francais).
16. Бучин Э.Ю., Денисенко Ю.И., Симакин С.Г. Структура термомиграционных каналов в кремнии. *Письма в ЖТФ*. 2004. Т. 30. Вып. 4. С. 70–75. <http://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/11337>.
17. Середин В.М., Попов В.П., Заиченко А.Н. и др. Формирование сквозных замкнутых ячеек в пластине кремния методом термомиграции. *Актуальные проблемы физики твердого тела (APSSP 2023)*: Сб. докл. X Международ. науч. конф. 22–26 мая 2023 г. Минск, 2023. С. 27–30.
18. Seredin V.M., Popov V.P., Zaichenko A.N. Optimizing conditions for formation of local zones for thermomigration in silicon. *Solid State Phenomena*. 2017. Vol. 265. P. 839–844. DOI: 10.4028/www.scientific.net/SSP.265.839.
19. Lomov A. A., Punegov V.I., Seredin V.M. Laue X-ray diffraction studies of the structural perfection of Al-doped thermomigration channels in silicon. *Journal of Applied Crystallography*. 2021. Vol. 54. P. 588–596. DOI: 10.1107/S1600576721001473.
20. Vanhellefont J., Swarnakar A.K., Van der Biest O., Temperature dependent Young's modulus of Si and Ge. *ECS Transactions*. 2014. Vol. 64. No 11. P. 283-292. DOI: 10.1149/06411.0283ecst.

References

1. Pfann W.G. *Zone Melting*. New York. John Wiley & Sons. 1966. 310 p.
2. Lozovsky V.N., Lunin L.S., Popov V.P. *Zonnaya perekristallizatsiya gradientom temperatury poluprovodnikovykh materialov* [Zone Recrystallization by Temperature Gradient of Semiconductor Materials]. Moscow. Metallurgiya Publ. 1987. 232 p. (In Russian).

3. Lozovsky V.N., Lunin L.S., Blagin A.V. *Gradientnaya zhidkofaznaya kristallizatsiya mnogokomponentnykh poluprovodnikovyykh materialov* [Gradient Liquid-Phase Crystallization of Multicomponent Semiconductor Materials]. Rostov-on-Don: SKNTs VSh Publ. 2003. 376 p. (In Russian).
4. Lozovsky V.N., Lunin L.S. *Pyatikomponentnye tverdye rastvory soedineniy AIIIIV: (Novye materialy optoelektroniki)* [Five-Component Solid Solutions of III-V Compounds: New Materials of Optoelectronics]. Rostov-on-Don. RGU Publ. 1992. 193 p. (In Russian).
5. Buchin E.Yu., Denisenko Yu.I. Ispolzovanie protsessov termomigratsii v tekhnologii MEMS [Use of thermomigration processes in MEMS technology]. *Nano- i mikrosistemnaya tekhnika* [Nano- and Microsystems Technology]. 2005. Iss. 9. P. 29–34 (In Russian).
6. Eslamian M., Saghir M.Z. Thermomigration applications in MEMS, NEMS and solar cell fabrication by thermal metal doping of semiconductors. *Fluid Dyn. Mater. Proces.* 2012. Vol. 8. No 4. P. 353–380. DOI: 10.3970/fdmp.2012.008.353
7. Lozovsky V.N., Popov V.P. O stabilnosti fronta rosta pri kristallizatsii metodom dvizhu-shchegosya rastvoritelya [On the stability of the growth front during crystallization by the moving solvent method]. *Kristallografiya* [Crystallography]. 1970. Vol. 15. Iss. 1. P. 149–155 (In Russian).
8. Cline H.E., Anthony T.R. Thermomigration of aluminum rich liquid wires through silicon. *J. Appl. Phys.* 1976. Vol. 47. Iss. 6. P. 2332–2336. DOI: 10.1063/1.323009.
9. Anthony T.R., Boah J.K., Chang M.F., Cline H.E. Thermomigration processing of isolation grids in power structures. *IEEE Transactions on Electron Devices.* 1976. Vol. 23. Iss. 8. P. 818–823. DOI: 10.1109/T-ED.1976.18492.
10. Cline H.E., Anthony T.R. High speed droplet migration silicon. *J. Appl. Phys.* 1976. Vol. 47. Iss. 6. P. 2325–2331. DOI: 10.1063/1.323008.
11. Cline H.E., Anthony T.R. On the thermomigration of liquid wires. *J. Appl. Phys.* 1978. Vol. 49. Iss. 5. P. 2777–2786. DOI: 10.1063/1.325157.
12. Cline H.E., Anthony T.R. Migration on fine molten wires in thin silicon wafers. *J. Appl. Phys.* 1978. Vol. 49. Iss. 4. P. 2412–2419. DOI:10.1063/1.325082.
13. Chang M., Kennedy R. The application of temperature gradient zone melting to silicon wafer processing. *J. Electrochem. Soc.* 1981. Vol. 128. No 10. P. 2193–2198. DOI: 10.1149/1.2127216.
14. Morillon B., Dilhac J.-M., Ganibal C., Anceau C. Study of aluminum thermomigration as a low thermal budget technique for innovative power devices. *Microelectron. Reliab.* 2003. Vol. 43. Iss. 4. P. 565–569. DOI: 10.1016/S0026-2714(03)00025-8.
15. Morillon B. Etude de la thermomigration de l'aluminium dans le silicium pour la réalisation industrielle de murs d'isolation dans les composants de puissance bidirectionnels. *Theses.* INSA Toulouse. 2002. 222 p. (Le Francais).
16. Buchin E.Yu., Denisenko Yu.I., Simakin S.G. Struktura termomigratsionnykh kanalov v kremnii [Structure of thermomigration channels in silicon]. *Pisma v Zhurnal Tekhnicheskoi Fiziki.* 2004. Vol. 30. Iss. 4. P. 70–75 (In Russian).
17. Seredin B.M., Popov V.P., Zaichenko A.N. et al. Formirovanie skvoznykh zamknytykh yacheek v plastine kremniya metodom termomigratsii [Formation of end-to-end closed cells in a silicon wafer using the thermomigration method]. *Aktualnye problemy fiziki tverdogo tela (APSSP 2023): Sbornik dokladov X Mezhdunarodoy nauchnoy konferentsii 22–26 maya 2023 g. Minsk, 2023* [Actual Problems of Solid State Physics (APSSP 2023): Collection of reports of the X International Scientific Conference. 22–26 May. 2023. Minsk]. P. 27–30 (In Russian).
18. Seredin B.M., Popov V.P., Zaichenko A.N. Optimizing conditions for formation of local zones for thermomigration in silicon. *Solid State Phenomena.* 2017. Vol. 265. P. 839–844. DOI: 10.4028/www.scientific.net/SSP.265.839.
19. Lomov A. A., Punegov V.I., Seredin B.M. Laue X-ray diffraction studies of the structural perfection of Al-doped thermomigration channels in silicon. *J. Appl. Crystallogr.* 2021. Vol. 54. P. 588–596. DOI: 10.1107/S1600576721001473.
20. Vanhellefont J., Swarnakar A.K., Van der Biest O., Temperature dependent Young's modulus of Si and Ge. *ECS Trans.* 2014. Vol. 64. No 11. P. 283–292. DOI: 10.1149/06411.0283ecst.

THE ROLE OF ELASTIC STRESS DURING THERMOMIGRATION OF LIQUID ZONES BASED ON ALUMINUM IN SILICON*

Shirokov V.B.^{1,2}, Seredin B.M.³, Timoshenko P.E.²,
Kalinchuk V.V.¹, Popov V.P.³

¹*Southern Scientific Center RAS, Rostov-on-Don, Russian Federation*

²*Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russian Federation*

³*M.I. Platov South-Russian State Polytechnic University (NPI),
Novocherkassk, Russian Federation*

vkalin415@mail.ru

Received by the Editor 2023/08/01

The method of thermomigration of liquid zones based on aluminum makes it possible to create complex structures of closed channels with boundaries formed from p - n junctions in single-crystal silicon wafers. The channels are characterized by the uniformity of their properties, and the pn junctions are characterized by their sharpness. Such structures are used in high-current electronics, photovoltaics, and microelectromechanical converters. Volumetric deformation inside and outside the channel due to alloying of silicon with aluminum leads to the formation of mechanical stresses. The equilibrium shape of the channels formed at high temperatures is determined by the minimum elastic energy and depends on the material parameters and geometry of the structure. Within the framework of the linear theory of elasticity, the behavior of elastic energy during the formation of the structure of thermomigration channels at high temperatures doped with aluminum in a single-crystalline (001) cut disk was studied. The simulation was performed using the finite element method in the COMSOL Multiphysics mathematical package. The study was carried out for practically important structures in which the direction of the edges is oriented along the diagonal of the square. Only such structures do not have breaks during the process of thermomigration. Based on the calculation results, it was revealed that the minimum elastic energy corresponds to structures with different crystalline orientations inside the channel and outside it – in the main silicon matrix. The direction of the crystalline axes inside the channel, corresponding to the minimum elastic energy, is rotated by 45 degrees in the plane of the disk relative to the direction of the axes of the main matrix of the silicon crystal. In addition, calculations showed that with such a turn, the shape of the channels changes. The minimum elastic energy corresponds not to vertical structures, but to inclined ones. The angle of inclination of the pyramids depends on the width of the channels and the distance between them.

Keywords: thermomigration, temperature gradient, liquid zone, elastic energy.

* Carried out with the support of the Ministry of Education and Science of Russia within the framework of the state task of the M.I. Platov Southern Russian State Polytechnic University (NPI) (project FENN-2023-0005).