

Монография

**ИННОВАЦИОННАЯ НАУКА,
ОБРАЗОВАНИЕ, ПРОИЗВОДСТВО
И ТРАНСПОРТ**

*ТЕХНИКА И ТЕХНОЛОГИИ,
ИНФОРМАТИКА, ТРАНСПОРТ,
АРХИТЕКТУРА*

2019
Книга 2
Часть 1





Лукин В.В., Львович И.Я., Пачурин Г.В., Толбатов В.А., Толбатов А.В. и др.

Лукин В.В., Львович И.Я., Пачурин Г.В., Толбатов В.А., Толбатов А.В. та ін.
Lukin V.V., Lvovich I.Ya., Pachurin G.V., Tolbatov V.A., Tolbatov A.V. and etc.

**ИННОВАЦИОННАЯ НАУКА, ОБРАЗОВАНИЕ,
ПРОИЗВОДСТВО И ТРАНСПОРТ:
ТЕХНИКА И ТЕХНОЛОГИИ, ИНФОРМАТИКА, ТРАНСПОРТ,
АРХИТЕКТУРА**

*ІННОВАЦІЙНА НАУКА, ОСВІТА, ВИРОБНИЦТВО І ТРАНСПОРТ:
ТЕХНІКА І ТЕХНОЛОГІЇ, ІНФОРМАТИКА, ТРАНСПОРТ, АРХІТЕКТУРА
INNOVATIVE SCIENCE, EDUCATION, PRODUCTION AND TRANSPORT:
TECHNOLOGY AND TECHNOLOGY, INFORMATICS, TRANSPORT, ARCHITECTURE*

**ВХОДИТ В РИНЦ SCIENCE INDEX
INDEXCOPERNICUS**

*входить до Міжнародних наукометричних баз
included in International scientometric databases*

МОНОГРАФІЯ

*МОНОГРАФІЯ
MONOGRAPH*

Одесса
Одеса / Odessa

Купрієнко СВ

Купрієнко СВ / Kuprienko SV
2019

УДК 001.895

ББК 94

И 57

*Авторский коллектив:**Колектив авторів / Author team:*

Абрамова В.В. (2), Агаджанова С.В. (10), Агаджанов-Гонсалес К.Х. (10), Богінська Л.О. (12), Богінська Л.О. (13), Болила Н.А. (5), Виганяйло С.М. (10), В'юнєнко О.Б. (10), Гончарова Д.А. (4), Джура С.Г. (7), Егорова И.Н. (11), Иванюта А.А. (5), Кривенко С.С. (2), Лукин В.В. (2), Львович И.Я. (8), Львович Я.Е. (9), Нестеренко Н.А. (5), Никифоров Р.П. (3), Панченко О.В. (1), Пачурин Г.В. (4), Преображенский А.П. (8,9), Преображенский Ю.П. (9), Рубель А.С. (2), Рубель А.С. (2), Строительева Н.И. (1), Толбатов А.В. (10,12), Толбатов В.А. (10,12), Толбатов С.В. (6,10,12), Червоний И.Ф. (1), Чопоров О.Н. (8), Чуприна М.О. (6), Чурсинов В.И. (7), Шпигунова Т.В. (14), Якимшина В.В. (7)

*Рецензенты:**Рецензенти / Reviewers:*

Бутенко Ольга Станиславовна, доктор технических наук, профессор, Национальный аэрокосмический университет имени М.Е. Жуковского, «Харьковский авиационный институт» - Глава 2

Кострова Вера Николаевна, доктор технических наук, профессор, проректор по мониторингу качества Воронежского института высоких технологий - Глава 8, Глава 9

И 57 **И**нновационная наука, образование, производство и транспорт: техника и технологии, информатика, транспорт, архитектура. Книга 2. Часть 1: серия монографий / [авт.кол. : В.В.Лукин, И.Я.Львович, Г.В.Пачурин, В.А.Толбатов, А.В.Толбатов и др.]. – Одесса: КУПРИЕНКО СВ, 2019 – 180 с. : ил., табл. – (Серия «Инновационная наука, образование, производство и транспорт» ; №2).

ISBN 978-617-7414-78-9

Інноваційна наука, освіта, виробництво і транспорт: техніка і технології, інформатика, транспорт, архітектура. Книга 2. Часть 1: серія монографій / [авт.кол. : В.В.Лукін, І.Я.Львович, Г.В.Пачурин, В.А.Толбатов, А.В.Толбатов та ін.]. - Одеса: КУПРІЄНКО СВ, 2019 - 180 с. : ил., табл. - (Серія «Інноваційна наука, освіта, виробництво і транспорт»; №2).

Монография содержит научные исследования авторов в области техники и технологий, информатики, транспорта, архитектуры. Может быть полезна для инженеров, руководителей и других работников предприятий и организаций, а также преподавателей, соискателей, аспирантов, магистрантов и студентов высших учебных заведений.

Монографія містить наукові дослідження авторів в області техніки і технологій інформатики, транспорту, архітектури. Може бути корисна для інженерів, конструкторів та інших працівників підприємств і організацій, а також викладачів, здобувачів, аспірантів, магистрантів і студентів вищих навчальних закладів.

The monograph contains scientific studies of authors in the field of engineering and technology computer science, transport, architecture. It may be useful for engineers, designers and other employees of enterprises and organizations, as well as teachers, applicants, graduate students, undergraduates and students of higher educational institutions.

УДК 001.895

ББК 94

© Коллектив авторов, научные тексты, 2019

© Куприенко С.В., оформление, 2019

© Институт морехозяйства и предпринимательства, оформление, 2019

ISBN 978-617-7414-78-9



Монография подготовлена авторским коллективом:

1. *Абрамова Виктория Валерьевна*, Национальный аэрокосмический университет имени М.Е. Жуковского «Харьковский авиационный институт», Украина, кандидат технических наук - *Глава 2 (в соавторстве)*
2. *Агаджанова Светлана Владимировна*, Сумской национальный аграрный университет, Украина, кандидат технических наук, доцент - *Глава 10 (в соавторстве)*
3. *Агаджанов-Гонсалес К.Х.*, Сумской национальный аграрный университет, Украина, старший преподаватель - *Глава 10 (в соавторстве)*
4. *Богинская Людмила Алексеевна*, Сумской национальный аграрный университет, Украина, кандидат экономических наук, старший преподаватель - *Глава 12 (в соавторстве), Глава 13*
5. *Болила Надежда Александровна*, Киевский национальный торгово-экономический университет, Украина, соискатель - *Глава 5 (в соавторстве)*
6. *Выганяйло Светлана Николаевна*, доцент, Сумской филиал Харьковского национального университета внутренних дел, Украина, кандидат экономических наук - *Глава 10 (в соавторстве)*
7. *Вьюненко Александр Борисович*, Сумской национальный аграрный университет, Украина, кандидат экономических наук, доцент - *Глава 10 (в соавторстве)*
8. *Гончарова Диана Анатольевна*, Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева, Россия, аспирант, старший преподаватель - *Глава 4 (в соавторстве)*
9. *Джура Сергей Георгиевич*, Донецкий национальный технический университет, Украина, кандидат технических наук, доцент - *Глава 7 (в соавторстве)*
10. *Егорова Ирина Николаевна*, Ростовский государственный университет путей сообщения, Россия, соискатель, доцент - *Глава 11*
11. *Иванюта Анастасия Александровна*, Национальный университет биоресурсов и природопользования Украины, Украина, кандидат технических наук - *Глава 5 (в соавторстве)*
12. *Кривенко Сергей Станиславович*, Национальный аэрокосмический университет имени М.Е. Жуковского «Харьковский авиационный институт», Украина, кандидат технических наук - *Глава 2 (в соавторстве)*
13. *Лукин Владимир Васильевич*, Национальный аэрокосмический университет имени М.Е. Жуковского «Харьковский авиационный институт», Украина, доктор технических наук, профессор - *Глава 2 (в соавторстве)*
14. *Львович Игорь Яковлевич*, Воронежский институт высоких технологий, Россия, доктор технических наук, профессор - *Глава 8 (в соавторстве)*
15. *Львович Яков Евсеевич*, Воронежский государственный технический университет, Россия, доктор технических наук, профессор - *Глава 9 (в соавторстве)*
16. *Нестеренко Наталия Анатольевна*, Киевский национальный торгово-экономический университет, Украина, соискатель, - *Глава 5 (в соавторстве)*
17. *Никифоров Радион Петрович*, Донецкий национальный университет экономики и торговли имени Михаила Туган-Барановского, Украина, кандидат технических наук, доцент - *Глава 3*



18. *Панченко Оксана Викторовна*, Запорожский национальный университет, Украина, аспирант - Глава 1 (в соавторстве)
19. *Пачурин Герман Васильевич*, Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева, Россия, доктор технических наук, профессор - Глава 4 (в соавторстве)
20. *Преображенский Андрей Петрович*, Воронежский институт высоких технологий, Россия, доктор технических наук, доцент - Глава 8 (в соавторстве), Глава 9 (в соавторстве)
21. *Преображенский Юрий Петрович*, Воронежский институт высоких технологий, Россия, кандидат технических наук, доцент - Глава 9 (в соавторстве)
22. *Рубель Алексей Сергеевич*, Национальный аэрокосмический университет имени М.Е. Жуковского «Харьковский авиационный институт», Украина, кандидат технических наук, - Глава 2 (в соавторстве)
23. *Рубель Андрей Сергеевич*, Национальный аэрокосмический университет имени М.Е. Жуковского «Харьковский авиационный институт», Украина, аспирант - Глава 2 (в соавторстве)
24. *Строителева Нина Ивановна*, Ивано-Франковский национальный медицинский университет, Украина, кандидат физико-математических наук, доцент - Глава 1 (в соавторстве)
25. *Толбатов Андрей Владимирович*, Сумской национальный аграрный университет, Украина, кандидат технических наук, доцент - Глава 10 (в соавторстве), Глава 12 (в соавторстве)
26. *Толбатов Владимир Аронович*, Сумской государственный университет, Украина, кандидат технических наук, доцент - Глава 10 (в соавторстве), Глава 12 (в соавторстве)
27. *Толбатов Сергей Владимирович*, Сумской национальный аграрный университет, в.о. доцента, Украина, кандидат технических наук, - Глава 6 (в соавторстве), Глава 10 (в соавторстве), Глава 12 (в соавторстве)
28. *Червоний Иван Федорович*, Украина, доктор технических наук, профессор - Глава 1 (в соавторстве)
29. *Чопоров Олег Николаевич*, Воронежский государственный технический университет, Россия, доктор технических наук, профессор - Глава 8 (в соавторстве)
30. *Чуприна Маргарита Александровна*, Киевский политехнический институт имени Игоря Сикорского, Украина, кандидат экономических наук, доцент - Глава 6 (в соавторстве)
31. *Чурсинов Виктор Иванович*, Донецкий национальный технический университет, Украина, кандидат технических наук, доцент - Глава 7 (в соавторстве)
32. *Штигунова Таусия Владимировна*, Национальная академия руководящих кадров культуры и искусств, Украина, студент - Глава 14
33. *Якимшина Виктория Викторовна*, Донецкий национальный технический университет, Украина, кандидат технических наук, доцент - Глава 7 (в соавторстве)

*Монографія підготовлена авторським колективом*

1. Абрамова Вікторія Валеріївна, Національний аерокосмічний університет імені М.С. Жуковського «Харківський авіаційний інститут», Україна, кандидат технічних наук - Глава 2 (у співавторстві)
2. Агаджанова Світлана Володимирівна, Сумський національний аграрний університет, Україна, кандидат технічних наук, доцент - Глава 10 (у співавторстві)
3. Агаджанов-Гонсалес К. Х., Сумський національний аграрний університет, Україна, старший викладач - Глава 10 (у співавторстві)
4. Богінська Людмила Олексіївна, Сумський національний аграрний університет, Україна, кандидат економічних наук, старший викладач - Глава 12 (у співавторстві), Глава 13
5. Боліла Надія Олександрівна, Київський національний торгово-економічний університет, Україна, здобувач - Глава 5 (у співавторстві)
6. Виганяло Світлана Миколаївна, доцент, Сумський філіал Харківського національного університету внутрішніх справ, Україна, кандидат економічних наук - Глава 10 (у співавторстві)
7. В'юненко Олександр Борисович, Сумський національний аграрний університет, Україна, кандидат економічних наук, доцент - Глава 10 (у співавторстві)
8. Гончарова Діана Анатоліївна, Нижегородський державний технічний університет ім. Р.С. Алексєєва, Росія, аспірант, старший викладач - Глава 4 (у співавторстві)
9. Джура Сергій Георгієвич, Донецький національний технічний університет, Україна, кандидат технічних наук, доцент - Глава 7 (у співавторстві)
10. Сгорова Ірина Миколаївна, Ростовський державний університет шляхів сполучення, Росія, здобувач, доцент - Глава 11
11. Іванюта Анастасія Олександрівна, Національний університет біоресурсів і природокористування України, Україна, кандидат технічних наук - Глава 5 (у співавторстві)
12. Керівник Сергій Станіславович, Національний аерокосмічний університет імені М.С. Жуковського «Харківський авіаційний інститут», Україна, кандидат технічних наук - Глава 2 (у співавторстві)
13. Лукін Володимир Васильович, Національний аерокосмічний університет імені М.С. Жуковського «Харківський авіаційний інститут», Україна, доктор технічних наук, професор - Глава 2 (у співавторстві)
14. Львович Ігор Якович, Воронежський інститут високих технологій, Росія, доктор технічних наук, професор - Глава 8 (в співавторстві)
15. Львович Яків Овсійович, Воронежський державний технічний університет, Росія, доктор технічних наук, професор - Глава 9 (у співавторстві)
16. Нестеренко Наталія Анатоліївна, Київський національний торгово-економічний університет, Україна, здобувач, - Глава 5 (у співавторстві)
17. Нікіфоров Радіон Петрович, Донецький національний університет економіки і торгівлі імені Михайла Туган-Барановського, Україна, кандидат технічних наук, доцент - Глава 3
18. Панченко Оксана Вікторівна, Запорізький національний університет, Україна, аспірант - Глава 1 (у співавторстві)
19. Пачурін Герман Васильович, Нижегородський державний технічний університет ім. Р.С. Алексєєва, Росія, доктор технічних наук, професор - Глава 4 (у співавторстві)
20. Преображенський Андрій Петрович, Воронежський інститут високих технологій, Росія, доктор технічних наук, доцент - Глава 8 (в співавторстві), Глава 9 (у співавторстві)
21. Преображенський Юрій Петрович, Воронежський інститут високих технологій, Росія, кандидат технічних наук, доцент - Глава 9 (у співавторстві)
22. Рубель Олексій Сергійович, Національний аерокосмічний університет імені М.С. Жуковського «Харківський авіаційний інститут», Україна, кандидат технічних наук, - Глава 2 (у співавторстві)
23. Рубель Андрій Сергійович, Національний аерокосмічний університет імені М.С. Жуковського «Харківський авіаційний інститут», Україна, аспірант, - Глава 2 (у співавторстві)
24. Строїтелеви Ніна Іванівна, Івано-Франківський національний медичний університет, Україна, кандидат фізико-математичних наук, доцент - Глава 1 (у співавторстві)
25. Толбатов Андрій Володимирович, Сумський національний аграрний університет, Україна, кандидат технічних наук, доцент - Глава 10 (у співавторстві), Глава 12 (у співавторстві)
26. Толбатов Володимир Аронович, Сумський державний університет, Україна, кандидат технічних наук, доцент - Глава 10 (у співавторстві), Глава 12 (у співавторстві)
27. Толбатов Сергій Володимирович, Сумський національний аграрний університет, в.о. доцента, Україна, кандидат технічних наук, - Глава 6 (у співавторстві), Глава 10 (у співавторстві), Глава 12 (у співавторстві)
28. Червоний Іван Федорович, Україна, доктор технічних наук, професор - Глава 1 (у співавторстві)
29. Чопоров Олег Миколайович, Воронежський державний технічний університет, Росія, доктор технічних наук, професор - Глава 8 (в співавторстві)
30. Чуприна Маргарита Олександрівна, Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського, Україна, кандидат економічних наук, доцент - Глава 6 (у співавторстві)
31. Чурсинов Віктор Іванович, Донецький національний технічний університет, Україна, кандидат технічних наук, доцент - Глава 7 (у співавторстві)
32. Шпігунова Таїсія Володимирівна, Національна академія керівних кадрів культури і мистецтв, Україна, студент - Глава 14
33. Якимичина Вікторія Вікторівна, Донецький національний технічний університет, Україна, кандидат технічних наук, доцент - Глава 7 (у співавторстві)



The monograph was prepared by the authors

1. Abramova Victoria, National Aerospace University named after M.E. Zhukovsky "Kharkov Aviation Institute", Ukraine, Candidate of Technical Sciences - Chapter 2 (co-authored)
2. Agadzhanova Svetlana Vladimirovna, Sumy National Agrarian University, Ukraine, candidate of technical sciences, associate professor - Chapter 10 (co-authored)
3. Agadzhanov-Gonzalez K.Kh., Sumy National Agrarian University, Ukraine, Senior Lecturer - Chapter 10 (co-authored)
4. Boginskaya Lyudmila Alekseevna, Sumy National Agrarian University, Ukraine, candidate of economic sciences, senior lecturer - Chapter 12 (co-authored), Chapter 13
5. Bolila Nadezhda Aleksandrovna, Kiev National University of Trade and Economics, Ukraine, applicant - Chapter 5 (co-authored)
6. Vygananyailo Svetlana Nikolaevna, Associate Professor, Sumy Branch of Kharkov National University of Internal Affairs, Ukraine, Candidate of Economic Sciences - Chapter 10 (co-authored)
7. Viunenko Oleksandr Borisovich, Sumy National Agrarian University, Ukraine, candidate of economic sciences, associate professor - Chapter 10 (co-authored)
8. Goncharova Diana Anatolyevna, Nizhny Novgorod State Technical University. R.E. Alekseeva, Russia, graduate student, senior lecturer - Chapter 4 (co-authored)
9. Dzhura Sergey Georgievich, Donetsk National Technical University, Ukraine, candidate of technical sciences, associate professor - Chapter 7 (co-authored)
10. Egorova Irina Nikolaevna, Rostov State University of Railway Engineering, Russia, Applicant, Associate Professor - Chapter 11
11. Ivanyuta Anastasia Aleksandrovna, National University of Life and Environmental Sciences of Ukraine, Ukraine, Candidate of Technical Sciences - Chapter 5 (co-authored)
12. Krivenko Sergey Stanislavovich, National Aerospace University named after M.E. Zhukovsky "Kharkov Aviation Institute", Ukraine, Candidate of Technical Sciences - Chapter 2 (co-authored)
13. Lukin Vladimir Vasilievich, National Aerospace University named after M.E. Zhukovsky "Kharkov Aviation Institute", Ukraine, Doctor of Technical Sciences, Professor - Chapter 2 (co-authored)
14. Lvovich Igor Yakovlevich, Voronezh Institute of High Technologies, Russia, Doctor of Technical Sciences, Professor - Chapter 8 (co-authored)
15. Lvovich Yakov Evseevich, Voronezh State Technical University, Russia, Doctor of Technical Sciences, Professor - Chapter 9 (co-authored)
16. Nesterenko Nataliya Anatolyevna, Kiev National University of Trade and Economics, Ukraine, applicant, - Chapter 5 (co-authored)
17. Nikiforov Radion Petrovich, Donetsk National University of Economics and Trade named after Mikhail Tugan-Baranovsky, Ukraine, candidate of technical sciences, associate professor - Chapter 3
18. Panchenko Oksana Viktorovna, Zaporizhzhya National University, Ukraine, graduate student - Chapter 1 (co-authored)
19. Pachurin German Vasilievich, Nizhny Novgorod State Technical University named after R.E. Alekseeva, Russia, Doctor of Technical Sciences, Professor - Chapter 4 (co-authored)
20. Preobrazhensky Andrey Petrovich, Voronezh Institute of High Technologies, Russia, Doctor of Technical Sciences, Associate Professor - Chapter 8 (co-authored), Chapter 9 (co-authored)
21. Preobrazhensky Yuri Petrovich, Voronezh Institute of High Technologies, Russia, Candidate of Technical Sciences, Associate Professor - Chapter 9 (co-authored)
22. Rubel Aleksey Sergeevich, National Aerospace University named after M.E. Zhukovsky "Kharkov Aviation Institute", Ukraine, Ph.D., - Chapter 2 (co-authored)
23. Rubel Andrei Sergeevich, National Aerospace University named after M.E. Zhukovsky "Kharkov Aviation Institute", Ukraine, graduate student, - Chapter 2 (co-authored)
24. Stroiteleva Nina Ivanovna, Ivano-Frankivsk National Medical University, Ukraine, candidate of physical and mathematical sciences, associate professor - Chapter 1 (co-authored)
25. Tolbatov Andrey Vladimirovich, Sumy National Agrarian University, Ukraine, candidate of technical sciences, associate professor - Chapter 10 (co-authored), Chapter 12 (co-authored)
26. Tolbatov Vladimir Aronovich, Sumy State University, Ukraine, candidate of technical sciences, associate professor - Chapter 10 (co-authored), Chapter 12 (co-authored)
27. Tolbatov Sergey Vladimirovich, Sumy National Agrarian University, acting Associate Professor, Ukraine, Candidate of Technical Sciences, - Chapter 6 (co-authored), Chapter 10 (co-authored), Chapter 12 (co-authored)
28. Chervonyi Ivan Fedorovich, Ukraine, Doctor of Technical Sciences, Professor - Chapter 1 (co-authored)
29. Oleg Choporov, Voronezh State Technical University, Russia, Doctor of Technical Sciences, Professor - Chapter 8 (co-authored)
30. Chuprina Margarita Aleksandrovna, Igor Sikorsky Kiev Polytechnic Institute, Ukraine, candidate of economic sciences, associate professor - Chapter 6 (co-authored)
31. Chursinov Viktor Ivanovich, Donetsk National Technical University, Ukraine, candidate of technical sciences, associate professor - Chapter 7 (co-authored)
32. Shpigunova Taisiya Vladimirovna, National Academy of Leading Cadres of Culture and Arts, Ukraine, Student - Chapter 14
33. Viktoria Yakimishina, Donetsk National Technical University, Ukraine, Candidate of Technical Sciences, Associate Professor - Chapter 7 (co-authored)



Содержание

ГЛАВА 1. ОБРАЗОВАНИЕ БОРСОДЕРЖАЩИХ КОМПЛЕКСОВ В МОНОКРИСТАЛЛАХ КРЕМНИЯ

Введение	14
1.1. Взаимодействие примесей и дефектов в кристаллической решетке.....	16
1.2. Исследование поведения примеси бора в монокристаллах кремния, выращенных по методу Чохральского	27
1.3. Влияние режимов термической обработки на параметры монокристаллов кремния, легированного бором	31
1.4. Межпримесное взаимодействие в монокристаллах кремния.....	33
1.5. Исследование термодинамических свойств монокристаллов кремния, легированного бором.....	35
1.6. Анализ результатов термической обработки монокристаллов кремния, легированных бором, с построением математической модели планирования эксперимента.....	41
Выводы	44

ГЛАВА 2. ПРОБЛЕМЫ АВТОМАТИЗАЦИИ ОБРАБОТКИ МНОГОКАНАЛЬНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ ПРИ ПРОСТРАНСТВЕННО-КОРРЕЛИРОВАННЫХ ПОМЕХАХ

Введение	45
2.1. Актуальность направления исследований.....	47
2.2. Метрики визуального качества.....	51
2.3. Фильтрация изображений и прогнозирования ее эффективности.....	52
2.4. Сжатие изображений с потерями	55
Выводы	59

ГЛАВА 3. ИННОВАЦИОННАЯ ТЕХНОЛОГИЯ АЭРИРОВАННОЙ ДЕСЕРТНОЙ ПРОДУКЦИИ НА ОСНОВЕ ВТОРИЧНОГО МОЛОЧНОГО СЫРЬЯ

60

ГЛАВА 4. МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АВТОМОБИЛЬНЫХ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ НА ВОЗДУХЕ И В КОРРОЗИОННОЙ СРЕДЕ

Введение	71
4.1. Методика экспериментов	72
4.2. Результаты экспериментов и их обсуждение.....	73
Выводы	76

ГЛАВА 5. ОЦЕНКА КАЧЕСТВА ГЛАЗИРОВАННЫХ КОНФЕТ С ПРАЛИНОВЫМ КОРПУСОМ

Введение	78
5.1. Рынок кондитерских изделий	78



5.2. Органолептическая оценка качества.....	79
5.3. Физико-химические показатели качества.....	82
Выводы	84

**ГЛАВА 6. ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ
ИННОВАЦИОННОГО РАЗВИТИЯ ПРЕДПРИЯТИЙ
УКРАИНЫ В УСЛОВИЯХ РЕСУРСНЫХ ОГРАНИЧЕНИЙ 85**

ГЛАВА 7. GDV-ТЕХНОЛОГИЯ ЭТИЧЕСКИЙ ВЕКТОР..... 91

**ГЛАВА 8. ФОРМИРОВАНИЕ АВТОМАТИЗИРОВАННЫХ
ИНФОРМАЦИОННЫХ СИСТЕМ ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ
РЕКЛАМНЫМИ ОБЪЕКТАМИ**

Введение	99
8.1. Реклама как инструмент маркетинга.....	100
8.2. Формирование требований к разрабатываемой системе	101
8.3. Выбор архитектуры разрабатываемой системы	102
8.4. Выбор протокола доставки контента	103
8.5. Выбор системы управления базой данных программного комплекса	105
Выводы	108

**ГЛАВА 9. ПРОБЛЕМЫ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ НА ОСНОВЕ МЕТОДОВ
DATA MINING**

Введение	109
9.1. Обзор методов автоматической рубрикации текстов.....	112
9.2. Метрики качества рубрицирования	114
9.3. Оценки метода машинного обучения на коллекции документов	115
9.4. Анализ характеристик, посвященных практическому сравнению методов машинного обучения.....	117
Выводы	117

**ГЛАВА 10. ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЕ РЕШЕНИЯ ДЛЯ СИСТЕМ
МОНИТОРИНГА СЕЛЬСКОГО ХОЗЯЙСТВА**

Введение	118
10.1. Основные задачи мониторинга сельского хозяйства при оптимизации производительности производства	119
10.2. Интеллектуальные решения по мониторингу сельского хозяйства	120
10.3. Преимущества использования мониторинговых решений IoT в сельском хозяйстве.....	122
Выводы	124



ГЛАВА 11. ИННОВАЦИОННОЕ РАЗВИТИЕ ТРАНСПОРТНОЙ СИСТЕМЫ ЮГА РОССИИ НА ОСНОВЕ РАЗВИТИЯ ВЫСОКОСКОРОСТНОГО ДВИЖЕНИЯ

Введение	126
11.1. Современное состояние железнодорожного пассажирского комплекса	126
11.2. Высокоскоростная магистраль – основа мультимодальной системы южного региона России	129
11.3. Вариационная методика решения оптимизационной задачи трассирования высокоскоростной пассажирской магистрали в среде компьютерной математики	131
Выводы	133

ГЛАВА 12. ФОРМИРОВАНИЕ ЭКОЛОГО-ОРИЕНТИРОВАННОЙ СТРАТЕГИИ РАЗВИТИЯ СТРОИТЕЛЬНОЙ ОТРАСЛИ

Введение	135
12.1. Анализ состояния развития строительной отрасли	135
12.2. Механизм финансирования строительных предприятий и мероприятий, связанных с охраной окружающей среды	138
12.3. Основные мероприятия реализации стратегических задач экологизации строительства	140
Выводы	143

ГЛАВА 13. ЭКОНОМИЧЕСКИЙ ИНСТРУМЕНТАРИЙ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО КОНТРОЛЯ ЗА ДЕЯТЕЛЬНОСТЬЮ СТРОИТЕЛЬНОЙ ОТРАСЛИ

Введение	144
13.1. Экологический менеджмент	144
13.2. Экологический мониторинг строительной отрасли	145
13.3. Экологический аудит строительства	145
Выводы	149

ГЛАВА 14. ФОРМИРОВАНИЕ ПРЕДМЕТНО-ПРОСТРАНСТВЕННОГО СОДЕРЖАНИЯ ДЕТСКОЙ БИБЛИОТЕКИ

Введение	150
14.1. Организация зоны творчества для детей	151
14.2. Создание комфортной среды в общественном пространстве	152
14.3. Функциональное зонирование	153
Выводы	155

Литература	157
------------------	-----



Зміст

ГЛАВА 1. УТВОРЕННЯ БОРСОДЕРЖАЩИХ КОМПЛЕКСІВ В МОНОКРИСТАЛАХ КРЕМНІЮ	
Вступ	14
1.1. Взаємодія домішок і дефектів в кристалічній решітці	16
1.2. Дослідження поведінки домішки бору в монокристалах кремнію, вирощених за методом Чохральського	27
1.3. Вплив режимів термічної обробки на параметри монокристалів кремнію, легованого бором	31
1.4. Межпрімесное взаємодія в монокристалах кремнію	33
1.5. Дослідження термодинамічних властивостей монокристалів кремнію, легованого бором.....	35
1.6. Аналіз результатів термічної обробки монокристалів кремнію, легованих бором, з побудовою математичної моделі планування експерименту	41
Висновки	44
ГЛАВА 2. ПРОБЛЕМИ АВТОМАТИЗАЦІЇ ОБРОБКИ БАГАТОКАНАЛЬНИХ ЗОБРАЖЕНЬ ПРИ ПРОСТОРОВО-КОРЕЛЬОВАНИХ ПЕРЕШКОДАХ	
Вступ	45
2.1. Актуальність напрямку досліджень.....	47
2.2. Метрики візуальної якості	51
2.3. Фільтрація зображень і прогнозування її ефективності	52
2.4. Зменшення розміру зображень з втратами.....	55
Висновки	59
ГЛАВА 3. ІННОВАЦІЙНА ТЕХНОЛОГІЯ АЕРІРОВАНОЇ ДЕСЕРТНОЇ ПРОДУКЦІЇ НА ОСНОВІ ВТОРИННОЇ МОЛОЧНОЇ СИРОВИНИ.....	
60	
ГЛАВА 4. МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ АВТОМОБІЛЬНИХ АЛЮМІНІЄВИХ СПЛАВІВ НА ПОВІТРІ І В КОРОЗІЙНОЇ СЕРЕДОВИЩІ	
Вступ	71
4.1. Методика експериментів.....	72
4.2. Результати експериментів та їх обговорення.....	73
Висновки	76
ГЛАВА 5. ОЦІНКА ЯКОСТІ ГЛАЗУРОВАНИХ ЦУКЕРОК З ПРАЛІНОВИМ КОРПУСОМ	
Вступ	78
5.1. Ринок кондитерських виробів	78
5.2. Органолептична оцінка якості.....	79
5.3. Фізико-хімічні показники якості.....	82
Висновки	84
ГЛАВА 6. ІНФОРМАЦІЙНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ІННОВАЦІЙНОГО РОЗВИТКУ ПІДПРИЄМСТВ УКРАЇНИ В УМОВАХ РЕСУРСНИХ ОБМЕЖЕНЬ.....	
85	
ГЛАВА 7. GDV ТЕХНОЛОГІЯ ЕТИЧНИЙ ВЕКТОР 89	
89	
ГЛАВА 8. ФОРМУВАННЯ АВТОМАТИЗОВАНИХ ІНФОРМАЦІЙНИХ СИСТЕМ ДЛЯ УПРАВЛІННЯ РЕКЛАМНИМИ ОБ'ЄКТАМИ	
Вступ	99
8.1. Реклама як інструмент	100
8.2. Формування вимог до розроблюваної.....	101
8.3. Вибір архітектури розробляється.....	102
8.4. Вибір протоколу доставки контенту.....	103
8.5. Вибір системи управління базою даних програмного комплексу	105
Висновки	108



ГЛАВА 9. ПРОБЛЕМИ ОБРОБКИ ДАНИХ НА ОСНОВІ МЕТОДІВ DATA MINING	
Вступ	109
9.1. Огляд методів автоматичної рубрикації текстів	112
9.2. Метрики якості рубрікування	114
9.3. Оцінки методу машинного навчання на колекції документів	115
9.4. Аналіз характеристик, присвячених практичному порівняно методів машинного навчання	117
Висновки	117
ГЛАВА 10. ІНТЕЛЕКТУАЛЬНІ РІШЕННЯ ДЛЯ СИСТЕМ МОНІТОРИНГУ СІЛЬСЬКОГО ГОСПОДАРСТВА	
Вступ	118
10.1. Основні завдання моніторингу сільського господарства при оптимізації продуктивності виробництва	119
10.2. Інтелектуальні рішення з моніторингу сільського господарства	120
10.3. Переваги використання моніторингових рішень ІоТ в сільському господарстві	122
Висновки	124
ГЛАВА 11. ІННОВАЦІЙНИЙ РОЗВИТОК ТРАНСПОРТНОЇ СИСТЕМИ ПІВДНЯ РОСІЇ НА ОСНОВІ РОЗВИТКУ ВИСОКОШВИДКІСНОГО РУХУ	
Вступ	126
11.1. Сучасний стан залізничного пасажирського комплексу	126
11.2. Високошвидкісна магістраль - основа мультимодальної системи південного регіону Росії	129
11.3. Вариационна методика рішення оптимізаційної задачі трасування високошвидкісної пасажирської магістралі в середовищі комп'ютерної математики	131
Висновки	133
ГЛАВА 12. ФОРМУВАННЯ ЕКОЛОГО-ОРІЄНТОВАНОЇ СТРАТЕГІЇ РОЗВИТКУ БУДІВЕЛЬНОЇ ГАЛУЗІ	
Вступ	135
12.1. Аналіз стану розвитку будівельної галузі	135
12.2. Механізм фінансування будівельних підприємств і заходів, пов'язаних з охороною навколишнього середовища	138
12.3. Основні заходи реалізації стратегічних завдань екологізації будівництва	140
Висновки	143
ГЛАВА 13. ЕКОНОМІЧНИЙ ІНСТРУМЕНТАРІЙ ЕКОЛОГІЧНОГО КОНТРОЛЮ ЗА ДІЯЛЬНІСТЮ БУДІВЕЛЬНОЇ ГАЛУЗІ	
Вступ	144
13.1. Екологічний менеджмент	144
13.2. Екологічний моніторинг будівельної галузі	145
13.3. Екологічний аудит будівництва	145
Висновки	149
ГЛАВА 14. ФОРМУВАННЯ ПРЕДМЕТНО-ПРОСТОРОВОГО ЗМІСТУ ДИТЯЧОЇ БІБЛІОТЕКИ	
Вступ	150
14.1. Організація зони творчості для дітей	151
14.2. Створення комфортного середовища в громадському просторі	152
14.3. Функціональне зонування	153
Висновки	155
Література	157



Content

CHAPTER 1. FORMATION OF BORON-CONTAINING COMPLEXES IN SILICON SINGLE CRYSTALS	
Introduction.....	14
1.1. The interaction of impurities and defects in crystalline grating	16
1.2. Study of the behavior of boron impurities in single crystals silicon grown by the czochralski method	27
1.3. The effect of heat treatment on the parameters of silicon single crystals doped with boron.....	31
1.4. Interimpurity interaction in silicon single crystals	33
1.5. Study of the thermodynamic properties of single crystals boron doped silicon	35
1.6. Analysis of the results of heat treatment of silicon single crystals doped with boron, with the construction of a mathematical experiment planning models	41
Conclusions.....	44
CHAPTER 2. PROBLEMS OF AUTOMATION OF PROCESSING OF MULTICHANNEL IMAGES WITH SPATIALLY CORRELATED INTERFERENCE	
Introduction.....	45
2.1. Relevance of research areas	47
2.2. Visual quality metrics.....	51
2.3. Image filtering and predicting its effectiveness.....	52
2.4. Lossy image compression.....	55
Conclusions.....	59
CHAPTER 3. INNOVATIVE TECHNOLOGY OF AERATED DESSERT PRODUCTS BASED ON SECONDARY DAIRY RAW MATERIALS.....	
	60
CHAPTER 4. MECHANICAL PROPERTIES OF AUTOMOTIVE ALUMINUM ALLOYS IN AIR AND IN A CORROSIVE ENVIRONMENT	
Introduction.....	71
4.1. Experimental procedure	72
4.2. Experimental results and discussion	73
Conclusions.....	76
CHAPTER 5. QUALITY ASSESSMENT OF GLAZED SWEETS WITH A PRALINE CASE	
Introduction.....	78
5.1. Confectionery market	78
5.2. Organoleptic quality assessment.....	79
5.3. Physico-chemical quality indicators	82
Conclusions.....	84
CHAPTER 6. INFORMATION SUPPORT FOR THE INNOVATIVE DEVELOPMENT OF UKRAINIAN ENTERPRISES IN THE CONTEXT OF RESOURCE CONSTRAINTS	
	85
CHAPTER 7. GDV TECHNOLOGY ETHICAL VECTOR	
	91
CHAPTER 8. THE FORMATION OF AUTOMATED INFORMATION SYSTEMS FOR MANAGING ADVERTISING OBJECTS	
Introduction.....	99
8.1. Advertising as a marketing tool.....	100
8.2. Formation of requirements for the developed system	101
8.3. Choice of architecture of the system under development.....	102
8.4. Content delivery protocol selection	103
8.5. Selection of database management system software complex	105
Conclusions.....	108



CHAPTER 9. PROBLEMS OF DATA PROCESSING BASED ON DATA MINING METHODS

Introduction.....109

 9.1. A review of methods for automatic text heading112

 9.2. Rubrication quality metrics114

 9.3. Evaluation of machine learning method on a collection of documents115

 9.4. Analysis of characteristics of practical comparing machine learning methods.....117

Conclusions.....117

CHAPTER 10. INTELLIGENT SOLUTIONS FOR AGRICULTURAL MONITORING SYSTEMS

Introduction.....118

 10.1. Main tasks of agricultural monitoring in optimizing production performance.....119

 10.2. Smart rural monitoring solutions farms.....120

 10.3. Benefits of using monitoring solutions lot in agriculture122

Conclusions124

CHAPTER 11. INNOVATIVE DEVELOPMENT OF THE TRANSPORT SYSTEM OF THE SOUTH OF RUSSIA BASED ON THE DEVELOPMENT OF HIGH-SPEED TRAFFIC

Introduction.....126

 11.1. Current state of passenger rail complex126

 11.2. High-speed highway - the basis of multimodal systems of the southern region of russia129

 11.3. Variational technique for solving the optimization problem of tracing a high-speed passenger highway in computer math.....131

Conclusions.....133

CHAPTER 12. FORMATION OF AN ENVIRONMENTALLY-FRIENDLY DEVELOPMENT STRATEGY FOR THE CONSTRUCTION INDUSTRY

Introduction.....135

 12.1. Analysis of the state of development of the construction industry135

 12.2. Mechanism for financing construction enterprises and activities related to environmental protection138

 12.3. Main activities for the implementation of the strategic objectives of the greening of construction140

Conclusions.....143

CHAPTER 13. ECONOMIC TOOLS FOR ENVIRONMENTAL CONTROL OVER THE ACTIVITIES OF THE CONSTRUCTION INDUSTRY

Introduction.....144

 13.1. Environmental management144

 13.2. Environmental monitoring of the construction industry.....145

 13.3. Environmental audit of construction145

Conclusions.....149

CHAPTER 14. FORMATION OF THE SUBJECT-SPATIAL CONTENT OF THE CHILDREN'S LIBRARY

Introduction.....150

 14.1. Organization of a creative zone for children.....151

 14.2. Creating a comfortable environment in a public space152

 14.3. Functional zoning153

Conclusions.....155

Literature157



ГЛАВА 1. ОБРАЗОВАНИЕ БОРСОДЕРЖАЩИХ КОМПЛЕКСОВ В МОНОКРИСТАЛЛАХ КРЕМНИЯ

УТВОРЕННЯ БОРВМІСНИХ КОМПЛЕКСІВ В МОНОКРИСТАЛАХ КРЕМНІЮ
THE FORMATION OF BORON-CONTAINING COMPLEXES IN SILICON SINGLE CRYSTALS

DOI: 10.30888/2707-1685.2019-02-01-004

Введение

Выращивание бездислокационных монокристаллов кремния по методу Чохральского с минимальным содержанием макро- и микродефектов структуры является одной из главных научных проблем и задач современности. Качество создаваемых микроэлектронных устройств в значительной степени зависит от совершенства исходных монокристаллов. Поэтому необходимо выращивать монокристаллы Si, в которых дислокации полностью отсутствуют (или их предельное содержание в объеме кристалла не превышает 10^3 см^{-2}), с равномерным распределением легирующих и остаточных примесей, с контролируемым и ограниченным содержанием собственных точечных дефектов структуры [1].

Дислокации, в свою очередь, оказывают существенное влияние на электрофизические свойства монокристаллов кремния. Это влияние связано с наличием упругих напряжений вокруг дислокации и оборванных (ненасыщенных) связей. Влияние дислокаций на работу приборов связано с типом приборов и технологией их изготовления. В настоящее время преимущественно налажено производство бездислокационных монокристаллов кремния. Обобщенная схема классификации дефектов кристаллической решетки представлена на схеме.



Схема классификации дефектов кристаллической решетки



В настоящее время представлена следующая характеристика некоторых типов микродефектов:

- *A – тип*: продукт взаимодействия атома кислорода с вакансией в кремнии. Устойчивы до 600К. Могут генерировать дислокации. А-дефекты располагаются в областях, удаленных от поверхности кристалла и от краев пластин, вырезанных из кристалла. Размер составляет 3...20 мкм [2]; ~1...3 мкм [3];

- *B – тип*: Ромбовидные и квадратные скопления точечных дефектов. Выделения, состоящие из собственных межузельных атомов кремния и атомов примесей кислорода и углерода. Размер дефектов составляет 15...45 нм; $N \sim 10^{10} \text{ см}^{-3}$ [4];

- *D – тип*: микропреципитаты, образующие в результате взаимодействия вакансий и атомов остаточного кислорода, с образованием кристаллической и аморфной фаз типа SiO_2 (50...60 нм; $N \sim 10^{13} \text{ см}^{-3}$ [5]);

- *пластинчатые преципитаты, дислокационные петли*: обладают достаточно высокой активностью в качестве центров гетерогенного зарождения дислокаций (~25 нм; 0,1...0,3 мкм; $N \sim 3 \cdot 10^{10}$; $5,8 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$ [6]);

- *дефекты упаковки*: нарушения законной последовательности атомов в их укладке в кристаллической решетке. Центры зарождения дислокаций. (1,5...2 мкм; $N = 0,25 \dots 5 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$ [6]);

- *комплекс примеси*: устойчивое образование в виде квазимолекулы в кристаллической матрице, которое обладает своими индивидуальными физическими свойствами. Обладает своей симметрией, которая отличается от симметрии правильного кристалла. Может занимать в решетке несколько эквивалентных положений относительно базового атома. Нахождение примеси в межузлии – электронейтральность (~54 нм; $N \sim 10^4 \text{ см}^{-3}$ [7])

Также процессы дефектообразования в бездислокационных монокристаллах кремния, выращенных по методу Чохральского, определяются наличием СТД и распределением фоновой примеси кислорода. В ходе выращивания можно выделить основные тепловые зоны [7]:

- вблизи 1683 К – фронта кристаллизации происходит рекомбинация СТД: вакансий и межузельных атомов; при легировании кремния бором до концентрации $\sim 6 \cdot 10^{10}$ имеет место эвтектика при 1676 К [8];

- 1373...1323 К – образование вакансионных микродефектов (микропоры, оксидные частицы) и кластеров межузельных атомов кремния;

- 1223...1023 К – распад твердого раствора кислорода с миграцией центров зарождения преципитатов (комплексов);

- 1023...723 К – растут размеры преципитатов, формируется общая картина распределения примесей в монокристалле кремния.

В зависимости от методов выявления, различают следующие типы дефектов в монокристаллах кремния, выращенных по методу Чохральского [9]:

- FPD (flow pattern defects) – фигуры травления, имеющие форму конуса; наблюдаются при высоких скоростях выращивания;

- COP (crystal originated particles) – фигуры травления пирамидальной



формы глубиной $\sim 0,14$ мкм, сечением $0,12 \dots 0,3$ мкм, ограниченные плоскостями $\{111\}$;

- IR LSTD (IR laser scattering tomography defects) – выявляемые с помощью лазерной рассеивающей томографии октаэдрические пустоты с линейными размерами $0,1 \dots 0,3$ мкм, грани которых покрыты окислом SiO_x . Та же природа, что и у COPs;

- SEPD (Secco etch pits defects) – ямки травления, выявляемые в травителе Секко, не имеющие конической формы;

- OPPD (optical precipitate profiler defects) – дефекты, выявляемые методом оптической интерференции.

FPD и IR LSTD имеют полосчатое распределение, обусловленное флуктуациями температуры на фронте кристаллизации.

Можно с большой уверенностью предполагать, что перечисленные виды дефектов являются одними и теми же дефектами, выявляемыми различными методами.

Микродефекты монокристаллов на сегодня приобретают все большее значение в связи со стремлением к минимализму размеров приборов. Стратегическими направлениями улучшения качества и структурного совершенства монокристаллов кремния является достижение оптимального соотношения между скоростями роста монокристаллов и градиентами температур, подпитка расплава, выдержка тепловых условий и режимов выращивания, качества исходного загрузочного материала.

В настоящей работе представлены основные результаты по исследованию такого вида дефекта как *образование комплексов примесей*. Особое внимание уделяется вопросу термодинамики, в частности конфигурационной энтропии. Представлен особый подход рассмотрения взаимодействия примесей при помощи закона Кулона.

Изменение удельного электрического сопротивления монокристаллов кремния прослеживается при варьировании режимов термической обработки, с последующим представлением математической модели данного процесса.

1.1. Взаимодействие примесей и дефектов в кристаллической решетке

Межпримесные взаимодействия. Известно [10], что состояние дефектов в монокристаллическом кремнии оказывает существенное влияние на его электрические и физические свойства. Процессы зарождения и роста дефектов непосредственно зависят от наличия в монокристалле кремния фоновых примесей кислорода и углерода. Присутствие в бездислокационных монокристаллах в сопоставимых концентрациях как фоновых примесей так и собственных межузельных атомов кремния, примесных атомов и вакансий – приводит к сложным взаимодействиям между ними. Установлено [10], что эти взаимодействия определяются условиями выращивания монокристалла кремния.

При сильном легировании монокристаллов кремния, кроме



взаимодействия примесей с атомами основного вещества и структурными дефектами, возможно взаимодействие атомов легирующего вещества друг с другом.

В работе [11] имеются следующие выводы в отношении равновесной микропримеси в кристалле:

- примесь (одноатомная, молекулярная, дефект) вписывается в локальную симметрию кристалла. Следовательно, ее потенциал характеризуется либо точечной группой кристалла, либо элементами точечной симметрии, входящими в малую группу;

- примесные атомы образуют связи с основными атомами. Эти связи можно рассматривать как деформированные связи основной решетки. К примеси необходимо причислять атомы основной решетки, образующие связи с примесными атомами. Дефект деформирует связи основных атомов, поэтому может рассматриваться как примесь.

Связи примесных состояний деформированы, они в симметричном отношении эквивалентны связям основной решетки. Поэтому основное многоэлектронное состояние решетки формируется вместе с основным состоянием примесных элементов. Плотность зарядов многоэлектронной функции основного состояния равномерно распределена по решетке, за исключением отдельных смещений (разряжений), соответствующих примесям. Они сказываются на энергетическом уровне основного состояния. При наличии примесей он искривляется – вместо прямой появляется кривая с максимумами или минимумами энергий [11].

Результатом взаимодействия примесных атомов является образование комплексов примесей, атомов матрицы с примесями, а также комплексов примесей с фоновыми примесями [12]. На рис.1.1 отображены основные типы дефектов.



Рис. 1.1. Основные типы дефектов в кристаллической решетке

● атом примеси ○ атом матрицы

а) раствор внедрения; б) раствор замещения.

Внутренние межпримесные взаимодействия в монокристаллическом кремнии изменяют свободную энергию кристалла как замкнутой термодинамической системы [13]. В свою очередь различают статистические, зарядовые, потенциальные, ассоциативные взаимодействия.

Статистические взаимодействия связаны с размещением структурных элементов по позициям кристаллической решетки. Они в свою очередь оказывают влияние на конфигурационную энтропию системы [14].



Зарядовые взаимодействия – это часть электромагнитных взаимодействий, обуславливающих выполнение закона сохранения зарядов, однако не приводящих к появлению избыточной энергии кристалла.

Потенциальные взаимодействия – это комплекс различных взаимодействий, приводящий к изменению свободной энергии за счет роста потенциальной энергии кристалла. Взаимодействия, при которых структурные элементы кристалла не создают ассоциатов, самостоятельно размещаются по позициям кристаллической решетки.

Ассоциативные (комплексобразующие) взаимодействия приводят к образованию ассоциатов или комплексов, т.е. новых структурных элементов решетки, обладающих определенными свойствами и размещаются по кристаллическим позициям как единое целое. В настоящее время комплексобразующие взаимодействия вызывают все больший интерес [15, 16, 17].

Комплексы примесей. Эффект политропии. В ряде источников [13, 8] высказывалось предположение о том, что в монокристаллах кремния и германия может протекать образование пары, состоящей из двух донорных (акцепторных) ионов, таких как P, B, As, и др., с образованием молекулы аналогичной молекуле водорода H₂.

При исследовании свойств монокристалла следует учитывать структурные особенности вещества во всех 3-х агрегатных состояниях: твердое (монокристалл), жидкое (расплав) и газообразное.

При исследовании твердого состояния авторы работ [9, 18, 1] в основном руководствовались данными измерений n (концентрации носителей заряда), τ (времени жизни неравновесных носителей заряда), ρ (электрического сопротивления), а также анализом структурных параметров кристаллической решетки (наличие микродефектов, дислокаций, сколов, трещин и т. д.). Было обнаружено несоответствие концентрации неравновесных носителей заряда и истинной концентрации примеси (независимо от легирования акцепторами или донорами). Нейтральность примесей объяснялась нахождением атомов примеси в позиции замещения.

Силы межатомного взаимодействия обеспечивают установление общего геометрического пространственного порядка в расположении атомов. Чем выше температура, тем интенсивнее их колебание (возбужденное состояние атома), что приводит к переходу атома в ионизированное состояние. При этом в результате взаимодействия атомов примеси с атомами матрицы (кремния) происходит образование определенных комплексов [19,20,21]. Перемещения атомов решетки могут изменять состояние ионизации дефекта. Предположительно, соседние атомы смещаются и сближаются настолько, что образуют между собой связи. При взаимодействии атомов элементов 3-й и 5-й групп периодической системы Менделеева в кремнии и германии происходит образование комплексов как в позиции замещения, так и в позиции внедрения. Первые, в свою очередь, электрически активны, вторые электрически нейтральны.

Комплекс примеси – это устойчивое образование в виде квазимолекулы в



кристаллической матрице, которое обладает своими индивидуальными физическими свойствами. Комплекс обладает своей симметрией, которая отличается от симметрии правильного идеального кристалла, и, соответственно, может занимать в решетке несколько эквивалентных положений относительно неподвижного базового атома.

Образование комплексов (сложных дефектов) происходит в несколько этапов: образование дефектов (дефектов по Шоттки, по Френкелю и т.д.) → их миграция → объединение с другими дефектами. В кремнии наблюдалось группирование вакансий с вакансиями, а также с кислородом, фосфором, литием и с другими примесными элементами [22,23]. Атом примеси находится под действием периодического поля кристаллической решетки и ближнего кулоновского поля. Потенциал этого кулоновского поля будет ослаблен в силу действия влияния всего кристалла в целом [24].

На основе законов квантовой механики электронные оболочки могут осуществлять не только кулоновские притяжения-отталкивания, но и ван-дер-ваальсовы силы притяжения (дисперсионное взаимодействие). Суммарное взаимодействие выражается уравнением Борна и Майера [25]

$$U_0 = N_0 \left[\frac{z_1 z_2}{r_0} A + \frac{c}{r_0^6} - B(r_0) - \frac{9}{4} h\nu_{\text{макс}} \right], \quad (1.1)$$

где $\frac{z_1 z_2 e^2}{r_0}$ – выражает действие кулоновских сил притяжения (отталкивания);

$\frac{c}{r_0^6}$ – дисперсионное взаимодействие (с - константа);

$B(r_0) \sim \frac{b}{r^n}$ – выражение, которое определяет отталкивающее взаимодействие,

где b – поправочный коэффициент из уравнения Ван-дер-Ваальса равный учетверенному объему молекул;

$h\nu_{\text{макс}}$ – нулевая энергия решетки при максимальных частотах $\nu_{\text{макс}}$ колебаний решетки.

Комплекс примесных атомов – комплексия – это термодинамически равновесный дефект в твердом растворе, который расположен либо в узлах кристаллической решетки и является электрически активным, либо в межузлиях – электрически неактивен [26].

Образование данных комплексов существенно влияет на температурные и концентрационные зависимости параметров кристаллической решетки, коэффициентов диффузии, растворимости примесных атомов [26,1] (чем выше предел растворимости примеси, тем при больших концентрациях имеет место отклонение концентрации легирующей примеси от концентрации носителей заряда – эффект политропии). Образование нейтральных и однократно



заряженных комплексов показано на рис. 1.2. (по данным [27])

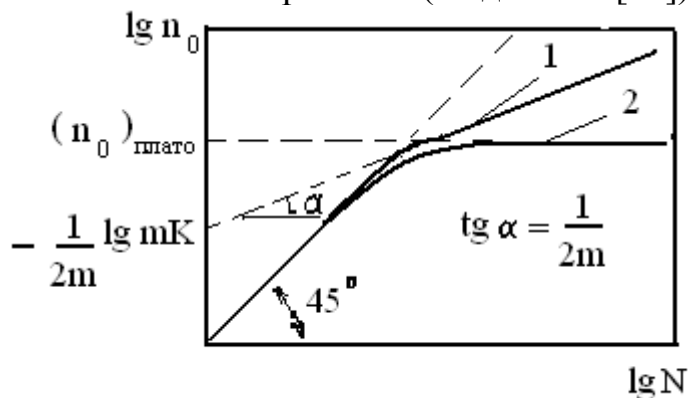


Рис. 1.2. Кривые $n_0(N)$ в случае комплексообразования примесей:
 1 – образование нейтральных комплексов; 2 – образование однократно заряженных комплексов.

Впервые подобные сложные ассоциированные дефекты были обнаружены в работах, посвященных исследованию ионизации примесей в Ge и Si [1,27]. Суть наблюдаемых на опыте эффектов отображена на рис. 1.3.

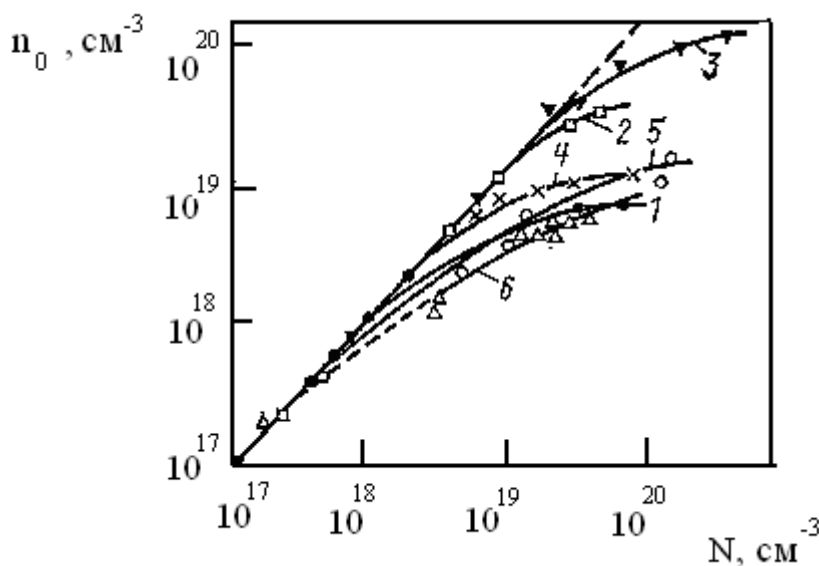


Рис. 1.3. Сопоставление концентраций носителей и примесей в германии, кремнии и арсениде галлия, по данным [27]:

1 – Ge-Sb; 2 – Ge-As; 3 – Si-As; 4 – GaAs-Te; 5 – GaAs-Se; 6 – GaAs-S.

В последнее время глубокий интерес представляет поведение примеси бора в монокристаллическом кремнии. Интерес вызван *эффектом политропии* и связан с отличием электрофизических характеристик в образцах кремния, легированных бором. Можно предположить, что одноименные ионы удерживают вакансии, образованные, например, при выходе примесных атомов из узлов решетки (под воздействием внешних условий). В каждый момент времени они, посредством диффузионного переноса, мигрируют к каким-либо стокам (границы дислокаций, межзеренные границы и др.). В результате



взаимодействия с вакансиями образуются комплексы вакансия-примесный ион. В свою очередь, для случая комплекса типа В-В можно записать $V^+ + V^{2-} + V^+ \rightarrow V-V$.

В данном случае дивакансия служит связующим и транспортным средством примесного иона для переноса его к стоку. При достижении стока примесный ион закрепляется на нем, а вакансия либо аннигилирует либо идет на образование другого дефекта. Новая вакансия, мигрируя, встречает новый примесный ион, взаимодействует с ним и «переправляет» его к стоку. Комплексы бора неустойчивы, нестабильны даже при комнатной температуре [28]. Возможно, что образованию комплексов сопутствует явление *коалесценции*, в результате которой происходит слияние частиц, протекающее самопроизвольно с образованием квазимолекулы под действием сил поверхностного натяжения. *Коалесценция* связана с диффузионными процессами, протекающими при выращивании монокристаллов кремния.

Монокристаллы кремния имеют ковалентный тип связи (обменный), но так как атомы в процессе выращивания переходят в ионизированное состояние, то, соответственно, тип связи будет смешанный. Для ковалентной связи характерна четко выраженная направленность действия межатомных сил. Силы притяжения обусловлены присутствием «отрицательного газа» между положительно заряженными ионами, т.е. электростатические силы. Силы отталкивания имеют частичный электростатический характер из-за взаимного отталкивания положительно заряженных ионов. По принципу Паули, электроны с одинаковым направлением спинов не могут занимать одну и ту же область пространства без повышения кинетической энергии системы. Электроны обладают некой «структурой», благодаря чему они поляризуются в ходе первого столкновения [29,30,31]. В случае взаимодействия двух одноименных атомов происходит переориентация направления электронов этих атомов.

Между любыми двумя нейтральными атомами или группами атомов действует сила притяжения. Она довольно мала и быстро уменьшается при увеличении расстояния между атомами. Поскольку кристалл представляет собой многочастичную квантово-механическую систему из ядер и электронов, то комплекс характеризуется энергией. При сближении атомов их электронные оболочки перекрываются и происходит электростатическое и квантово-механическое отталкивания. Но, в случае, когда сильно увеличивается концентрация или уменьшается диэлектрическая постоянная среды, то «атмосфера», которая окружает атомы, значительно уменьшается, что приводит к уплотнению «атмосферы» (т.е. удерживанию атомов на близком расстоянии) [8]. По теории Дебая и Хюккеля [8] одним из основных положений является введение понятия об ионной атмосфере противоположного знака, которой стремится окружить себя ион.

Атомы бора, находясь в межузлиях, могут вызывать смещение атомов матрицы из узлов решетки с образованием электрически нейтральных комплексов SiB_x (т.е. межузельный атом кремния захватывается ионом бора и



происходит образование гантели $\text{Si}^+ - \text{B}^-$ [13]. Огромный вклад вносит и фоновая примесь кислорода, которая, как известно [13], образует с бором электрически неактивные комплексы (комплексы типа BO_x с $x=5$).

Исследованию комплексов примеси посвящено много работ [32,33], т.к. образование данного типа дефекта в полной мере оказывает влияние на электрофизические параметры, выращенного методом Чохральского, монокристаллического кремния. Комплексообразование примесей обусловлено *эффектом политропии*, т.е. деградацией (изменением) параметров монокристаллов кремния (концентрации носителей заряда, удельного электрического сопротивления, времени жизни неравновесных носителей заряда и т.д.). Атомы примеси совместно с дефектами образуют сложные комплексы, которые являются ловушками для носителей заряда, и в результате электроны (дырки) «живут» не в зоне проводимости (валентной зоне), а «сидят» на энергетических уровнях, образованных этими комплексами [34].

Расплав кремния имеет структуру жидкости, которая состоит из квазикристаллов и хаотично блуждающих (в зависимости от температуры) атомов кремния. Энергия связи частиц в комплексах с $m>1$ будет намного выше, чем у простой пары колеблющихся атомов (с $m=1$), и вероятность образования комплексов будет убывать с увеличением числа атомов m .

Различие энергии связи атомов примеси в разных комплексах проявится в различии температур кристаллизации основного кристалла и комплекса. По данным [1], температура кристаллизации комплексов будет выше температуры кристаллизации основного кристалла, т.е. *комплексы примесей* в выращенном монокристалле кремния как бы «заморожены». В работе [1] показано присутствие многоатомных молекул в расплавах типа N_2 , O_2 , O_3 , P_4 , S_8 , что они не являются продуктами вторичных реакций, а отражают структуру расплавленного кристалла.

Скорость зарождения m -мерного комплекса в объеме жидкой фазы можно записать как:

$$g_m = N_A^x \exp\left[-\frac{E_m}{k_0 T}\right] \exp\left[-\frac{c\sigma_m}{T(\Delta T_m)^2}\right], \quad (1.2)$$

где

N_A^x - концентрация примеси в жидкой фазе, см^{-3} ;

E_m - энергия активации перехода атома в m -мерный комплекс;

c - постоянная;

σ_m - величина, аналогичная поверхностному натяжению;

ΔT_m - концентрационное переохлаждение расплава за счет кристаллизации m -мерного комплекса.

В ряде случаев необходимо оценить значение $\lg K$ при достаточно высоких температурах или осуществить расчет термодинамической системы реакции, для которой ход теплоемкостей при таких температурах неизвестен. Для этого



используются методы приближенных вычислений [25].

В случае легирования кремния бором, можно записать уравнение экзотермической реакции:



где Q_p – тепловой эффект реакции, кДж/моль.

Для вычисления неизвестного значения T используем приближенное уравнение Нернста

$$\lg K_{p(\text{исх})} = -\frac{Q_p}{19.142T} + \sum \nu \lg T + \sum \nu \gamma, \quad (1.4)$$

где $\sum \nu$ - число молей исходных веществ минус число продуктов реакции;

$\sum \nu \gamma$ - сумма условных химических постоянных исходных веществ минус сумма этих постоянных продуктов реакции.

Методы определения дефектов примеси. Установление природы некоторых видов дефектов сопряжено с трудностями их выявления [35]. Исследование явления *политропии*, наблюдаемое при выращивании монокристаллов кремния, наталкивается на большое число методических трудностей. Дефекты в виде комплексов практически невозможно определить рентгеновскими методами, так как уже 1 % одной фазы, представляющей собой примесь в фазе, не может быть найден рентгеноструктурным анализом [1]. Локальный анализ по вторичному рентгеновскому излучению при электронной бомбардировке кристалла, если удастся достичь достаточно высокой разрешающей силы этого метода. Полезную информацию могут дать опыты по рассеянию рентгеновских лучей и нейтронов. Большая надежда на методы, связанные с прохождением ультразвука в кристаллах и жидкостях.

Существование комплексов атомов примеси, которые присутствуют в кристалле может объяснить расхождение в концентрациях носителей заряда и концентрации легирующей вводимой примеси, найденных химическим анализом и из измерений коэффициента Холла [1].

Прямое подтверждение образования в кристаллах комплексов было получено при исследовании масс-спектров кремния. При масс-спектральных исследованиях монокристаллов кремния легированных мышьяком, была зафиксирована линия, принадлежащая ионам $(\text{SiAs}_2)^+$, но ее интенсивность была слабой – на уровне 10^{-8} %, т.е. на границе чувствительности прибора.

Исследование того, каким образом примеси в кремнии становятся электрически неактивными, является важным для дальнейшего развития электроники. Одной из особенностей современной физики является наглядность. Визуализацией примесных комплексов занимаются много научно-исследовательских лабораторий с широким спектром используемого дорогого оборудования, совершенствуя существующие методы.

Широкое распространение получила *растровая электронная микроскопия* (РЭМ) для прямого наблюдения и исследования дефектов в полупроводниках [36]. В основе работе РЭМ лежит принцип сканирования исследуемой



поверхности электронным зондом. В результате взаимодействия электронного пучка с объектом исследования в точке встречи возникают вторичные, отраженные, поглощенные и прошедшие электроны. Любой из этих электронных потоков может быть реализован в виде полезного видеосигнала. Основное преимущество РЭМ перед другими методами изучения дефектов заключается в том, что она позволяет не просто наблюдать дефекты, но одновременно прослеживать процессы их трансформации и движения в материале [37,38]. Большие возможности РЭМ при исследовании структурных и технологических дефектов в кремнии связаны с использованием РЭМ в режиме наведенного тока (НТ) [39].

Исследователям из Lucent Technologies [40] с помощью просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения удалось наблюдать отдельные атомы примеси и примесные комплексы сурьмы в сильно легированном кремнии (рис. 1.4). В этой работе были подготовлены специальные образцы с толщиной менее 3 нм. Концентрация примеси (сурьмы, которая относительно кремния является донором) в исследуемых образцах составляла $9,35 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, а концентрация свободных электронов по данным холловских измерений составляла $6,5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, т.е. примерно 30% примесей являлись электрически неактивными.

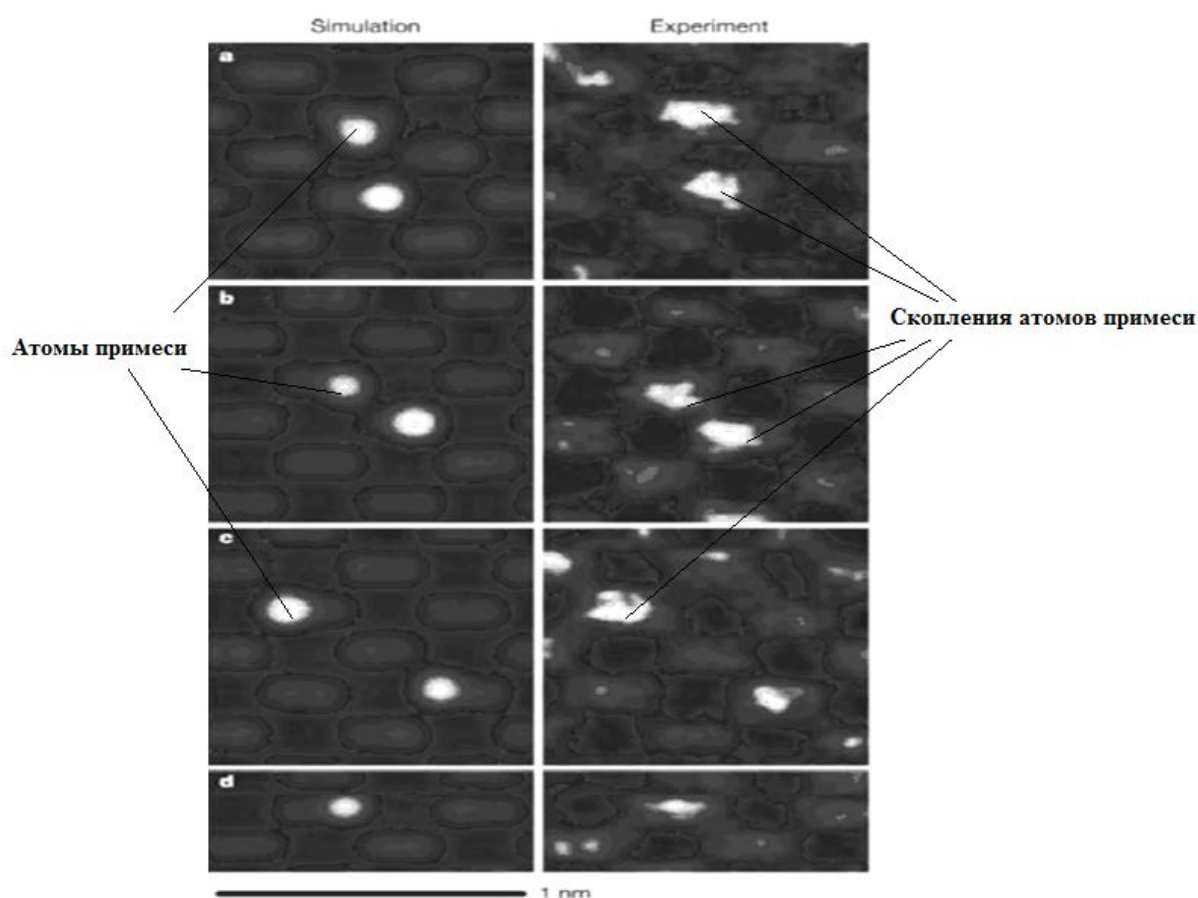


Рис. 1.4. Модельные и экспериментальные изображения разных типов комплексов с участием атомов примеси. Атомы примеси (точнее, колонки атомов, содержащие примесь) показаны стрелками.



Широко используемая зондовая микроскопия (сканирующая туннельная микроскопия, атомно-силовая микроскопия и т.д.) позволяет наблюдать поверхности образца; просвечивающая электронная микроскопия высокого разрешения на сегодня требует предварительно подготовленные достаточно тонкие образцы исследуемых пластин [41,42].

Американские ученые сумели улучшить максимально достижимое разрешение рентгеновской микроскопии до 8 нм. С помощью дифракционной рентгеновской микроскопии будет реально получать трехмерные изображения объектов с разрешением в 2-3 ангстрема. Экспериментальным подтверждением существования крупных дефектов в монокристаллах кремния, легированных бором, являются результаты работы, полученные методом сканирующей лазерной ИК-микроскопии [43]. По данным работы [44] атомы примеси бора могут находиться в междоузлиях и вызывать смещения атомов кремния из узлов кристаллической решетки с образованием электрически нейтральных комплексов B-Si с ионным типом связи.

Применение перечисленных выше методов рентгеновской топографии, электронной микроскопии и др. в условиях промышленного производства весьма затруднительно, вследствие их дороговизны.

Термическая обработка монокристаллов кремния. Вследствие малой энергии ионизации ($\sim 0,04$ эВ) атомы бора в кремнии при комнатной температуре практически полностью ионизированы и концентрация носителей заряда может определяться концентрацией легирующей примеси, вводимой в кристалл [45].

В работе [46] получено значение $E=2,0...2,1$ эВ (энергия активация междоузельных атомов бора) для $T=600$ °С близко к приведенному значению в [47] энергии активации отжига междоузельных атомов бора в расщепленных конфигурациях 1,7...1,8 эВ. Интервал температуры отжига составлял 550...600 °С, что близко к температурному интервалу распада комплексов B-i (i – междоузельный атом) ($T \geq 600$ °С).

Результаты исследований в работе [47] позволяют установить причину противоречивости данных литературы о роли атомов В в процессах структурных перестроек в Si при большой скорости генерации точечных дефектов. С одной стороны, в работе [48] утверждается, что атомы бора входят в состав стержнеобразных дефектов (СД). С другой, по данным [49] плотность и размеры СД в кристаллах с $N \geq 10^{19}$ см⁻³ значительно меньше по сравнению с нелегированными кристаллами. Результаты экспериментов по облучению легированных бором кристаллов кремния электронами высоковольтного электронного микроскопа (ВЭМ) показывают, что атомы бора могут являться как центрами аннигиляции, так и центрами зарождения СД. Условия проявления той или иной роли атомов В определяются наличием стока для генерируемых облучением вакансий (v). Сток v на окисленную поверхность Si вызывает повышение концентрации i (междоузельных атомов) в приповерхностных областях, так что атомы В служат центрами образования СД.



Также наблюдается формирование петель при облучении в ВЭМ сильнолегированных атомами фосфора (Р) кристаллов Si [49]. Процесс возникновения дислокационных петель включает последовательные реакции взаимодействия точечных дефектов с атомами Р. Увеличение энергии активации в процессах взаимодействия i с комплексами Р- v до значений в интервале $0,6...1,3$ эВ является причиной возникновения петель при достаточно большой температуре кристаллов $T \geq 600^\circ \text{C}$. Наличие энергетического барьера для взаимодействия i с комплексами Р- v уменьшает также скорость аннигиляции v и i в сильнолегированных Р кристаллах Si.

Известно [50], что с возрастанием концентрации легирующего элемента свыше $1,0 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ прирост концентрации носителей заряда начинает отставать от концентрации атомов легирующей примеси (явление политропии).

Известно [34,51,12], что в объеме монокристаллического кремния независимо от степени легирования и типа примеси имеются дефекты, которые значительно изменяют свойства монокристаллов. При последующей термической обработке монокристаллов кремния, легированных бором, наблюдается увеличение времени жизни неравновесных носителей заряда ($\tau_{н.з.}$), и это объяснялось вероятным освобождением фоновой примеси кислорода из примесного комплекса В-О [52]. Состояние этих дефектов нестабильно.

Имеется три основных температурных интервала, при которых образуются термодоноры ТД1, ТД2, ТД3 в монокристаллах кремния: $573...773 \text{ K}$, $873...1173 \text{ K}$, $1173...1373 \text{ K}$. В процессе дальнейшего использования ранее выращенные монокристаллы кремния подвергаются различным термическим обработкам, которые изменяют характеристики монокристаллического кремния. Поэтому исследование поведения примесей в объеме монокристаллического кремния является важным для развития микроэлектроники и солнечной энергетики.

Возможно, что сложные дефекты, образующиеся при закалке, соответствуют не преобладающим дефектам, а тем, которые обладают наибольшей возможностью быть захваченными примесями, вследствие чего образуются стабильные комплексы [53]. Например, преобладающими дефектами могут быть междоузлия, а дефектами, присутствующими после закалки, могут быть вакансионно-примесные комплексы, если междоузлие не в состоянии образовать устойчивый комплекс при комнатной температуре. В кремнии существует много вакансионно-примесных комплексов, про которые известно, что они устойчивы при комнатной температуре, однако не наблюдались собственные междоузлия даже в форме связанных с междоузлием дефектов. Причина, почему комплексы, включающие междоузлия, до сих пор не наблюдались, неясна, но может быть это результат того, что для большинства из них соответствующая энергия связи меньше kT (при комнатной температуре). Следовательно, их концентрация всегда мала по сравнению с концентрацией вакансионных комплексов [53].

По мнению [53], все дефекты электрически активны, так как введение нейтральных дефектов, которые не захватывают свободных носителей, не



может изменить их концентрацию; что при закалке не происходит исчезновения дефектов.

С увеличением температуры отжига ($T_{отж}$) кластеры растут и стягиваются (коагулируют) в фазовые выделения. Это вызвано действием сил электростатического отталкивания одноименно заряженных частиц и адсорбционной защитой. Заряд на поверхности частиц пропорционален величине их электрокинетического потенциала, снижение которого до некоторого критического значения вызывает нарушение стабильности и приводит к коагуляции частиц. Появление центров, по данным [54], есть следствие прямого взаимодействия атомов Si между собой. Фазовым выделениям предшествуют нефазовые, которые зависят от пересыщения и режимов термообработки и, которые определяют характер и дальнейший рост преципитатов.

Известно [55], что после облучения в результате перехода бора в межузельное положение образуется электрически неактивный бор, который взаимодействует с вакансионными дефектами и переходит в электрически неактивное состояние.

По данным [56], связи P-P в Si невыгодны, потеря энергии составляет 0,2 эВ на атом P. Фосфор может накапливаться вблизи идеальной границы SiO_2/Si вначале в виде одиночных атомов, а затем в виде пар.

В ходе повышения $T_{отж}$ образуется большое количество вакансий, которые играют значительную роль в образовании дефектов структуры. Вакансия может быть захвачена примесью кислорода – образование V-O-комплекса (A-центр); захвачена легирующей примесью – создание E-центра; образовать ди-, три- и др [53]. Если их количество сравнимо или превосходит количество примесных атомов, то они аккумулируются на границе и оказывают влияние на сегрегацию примесей.

Комплексообразование в монокристаллическом кремнии на сегодня является недостаточно изученным, т.к. помимо комплексов бора в кремнии известны комплексы примесей сурьмы, фосфора, мышьяка, меди, серы и др., которые ведут себя по-разному в экспериментальных условиях. Для полного рассмотрения образования комплексов необходимо провести термодинамические расчеты данного вида дефекта, а также провести исследование параметров пластин монокристаллического кремния до и после термической обработки.

1.2. Исследование поведения примеси бора в монокристаллах кремния, выращенных по методу Чохральского

В данной работе представлены результаты по выявлению комплексов примеси бора в объеме монокристаллического кремния [45]. После расплавления шихты для повышения точности легирования выращивали «пробный» монокристалл (диаметр ~30 мм, масса 30...40 г). Значение удельного электрического сопротивления ($УЭС$) такого монокристалла кремния



позволяет с высокой достоверностью судить о УЭС по верхнему торцу выращиваемого крупногабаритного монокристалла, не подвергая его термообработке для устранения влияния ростовых термодоноров. В табл.1 ниже приведены концентрации бора в выращенном монокристалле N_B , используемой лигатуре $N_B^{лиг}$, шихтовой загрузке $N_B^{шихт}$, а также масса лигатуры $M_{лиг}$, вводимой в расплав (расчетная и откорректированная по данным измерений УЭС «пробных» монокристаллов кремния).

Массу лигатуры ($M_{лиг}$), необходимую для получения монокристалла кремния с заданной концентрацией бора определяли по формуле:

$$M_{лиг}^{расч} = \frac{M_{шихт}}{k_{эф}} \cdot \frac{N_B^{кр} - N_B^{шихт}}{N_B^{лиг}}, \quad (2.1)$$

где $M_{шихт}$ - масса шихты, загруженной в тигель, кг;

$k_{эф}$ - эффективный коэффициент распределения бора, в условиях проводимого эксперимента $k_{эф}=0,84$;

$N_B^{кр}$, $N_B^{шихт}$, $N_B^{лиг}$ - концентрации бора в выращиваемом монокристалле, шихте и лигатуре соответственно, $см^{-3}$.

Таблица 2.1

Определение массы лигатуры, необходимой для получения монокристаллов кремния с заданной концентрацией бора

№	$N_B^{кр}$, $см^{-3}$	Масса шихты, кг	$N_B^{шихт}$, $см^{-3}$	$N_B^{лиг}$, $см^{-3}$	$M_{лиг}^{расч}$, кг	$M_{лиг}^{откorr}$, кг	$N_B^{факт}$, $см^{-3}$
1	$1,1 \cdot 10^{15}$	24	$7,64 \cdot 10^{14}$	$3,7 \cdot 10^{19}$	0,26	0,67	$1,73 \cdot 10^{15}$
2			$3,78 \cdot 10^{14}$		0,56	0,67	$1,27 \cdot 10^{15}$
3			$5,23 \cdot 10^{14}$		0,45	0,67	$1,44 \cdot 10^{15}$
4	$1,23 \cdot 10^{16}$	32	$7,8 \cdot 10^{15}$	$1,29 \cdot 10^{21}$	0,132	0,28	$1,83 \cdot 10^{16}$
5			$7,18 \cdot 10^{15}$		0,15	0,25	$1,63 \cdot 10^{16}$
6		35	$9,29 \cdot 10^{15}$		0,097	0,16	$1,46 \cdot 10^{16}$
7			$1,74 \cdot 10^{15}$		0,339	0,35	$1,27 \cdot 10^{16}$
8	$1,13 \cdot 10^{19}$	32	$7,54 \cdot 10^{18}$	$9,64 \cdot 10^{22}$	1,49	2,9	$1,55 \cdot 10^{19}$
9			$1,62 \cdot 10^{19}$		-	3,3	$1,88 \cdot 10^{19}$
10			$1,78 \cdot 10^{19}$		-	3,2	$2,09 \cdot 10^{19}$
11			$1,32 \cdot 10^{19}$		-	2,0	$1,73 \cdot 10^{19}$

На основании данных таблицы рассчитана фактическая концентрация бора в монокристаллах кремния после легирования $N_B^{факт}$ в соответствии с формулой:

$$N_B^{факт} = \frac{(M_{лиг}^{откorr} - M_{лиг}^{расч}) \cdot N_B^{лиг}}{M_{шихт}} + N_B^{кр} \quad (2.2)$$

Проведенные расчеты экспериментальных данных показали, что при выращивании промышленных монокристаллов кремния, легированных бором $\geq 1,1 \cdot 10^{15} см^{-3}$, весьма существенная его часть (от 30 до 60%) находится в



электрически неактивном состоянии, что можно наблюдать наглядно из приведенного графика (рис.2.1).

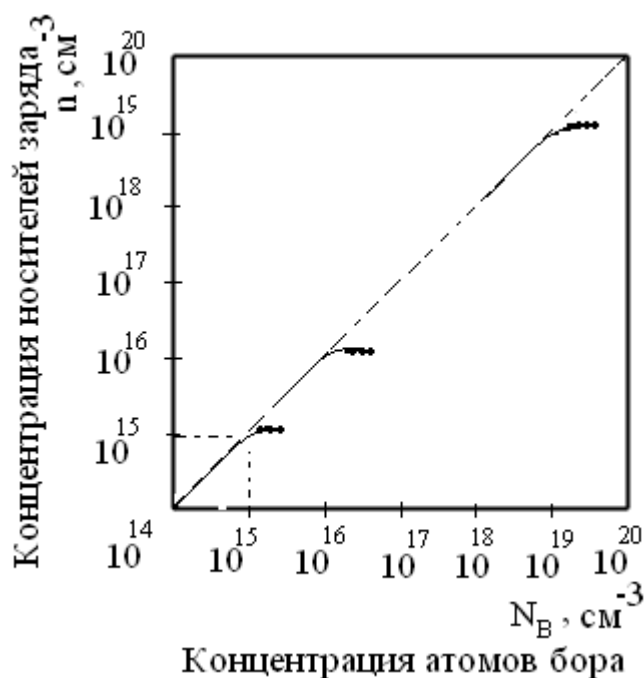


Рис.2.1. Сопоставление концентраций носителей и примеси бора в кремнии

Для установления причин нахождения части бора в электрически неактивном состоянии был проведен эксперимент по выращиванию методом Чохральского монокристалла кремния, легированного бором до $1,3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, с последующей «протяжкой» данного монокристалла, перекристаллизацией вертикальной бестигельной зонной плавкой (БЗП), рис. 2.2. Диаметр монокристалла составлял 76...78 мм, длина ~ 740 мм, кристаллографическая ориентация $\langle 100 \rangle$. Концентрация кислорода по верхнему торцу монокристалла составляла $8,7 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, по нижнему торцу – $5,6 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Концентрации углерода для верхнего и нижнего торцов – $2,2 \cdot 10^{16}$ и $4,6 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ соответственно. После одного прохода расплавленной зоны со средней скоростью на цилиндрической части монокристалла $0,0023 \text{ см/с}$ УЭС и концентрация кислорода заметно уменьшились: $N_O = 2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ на верхнем торце монокристалла, $N_O = 3,6 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ на нижнем торце. Концентрация углерода практически не изменилась: $2,0 \cdot 10^{16}$ и $4,5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ на верхнем и нижнем торцах соответственно. Удаление кислорода при бестигельной зонной плавке, сопровождающееся повышением электрической активности бора (снижение УЭС), позволяет заключить, что часть бора, содержащаяся в монокристалле, образует с кислородом электрически неактивные комплексы [45, 57].

Поскольку в исследуемых диапазоне концентрации бора выращенные монокристаллы кремния были бездислокационными, с плотностью микродефектов менее 10^2 см^{-2} , то представляло интерес установить вероятность существования в их объеме комплексов из нескольких атомов бора.

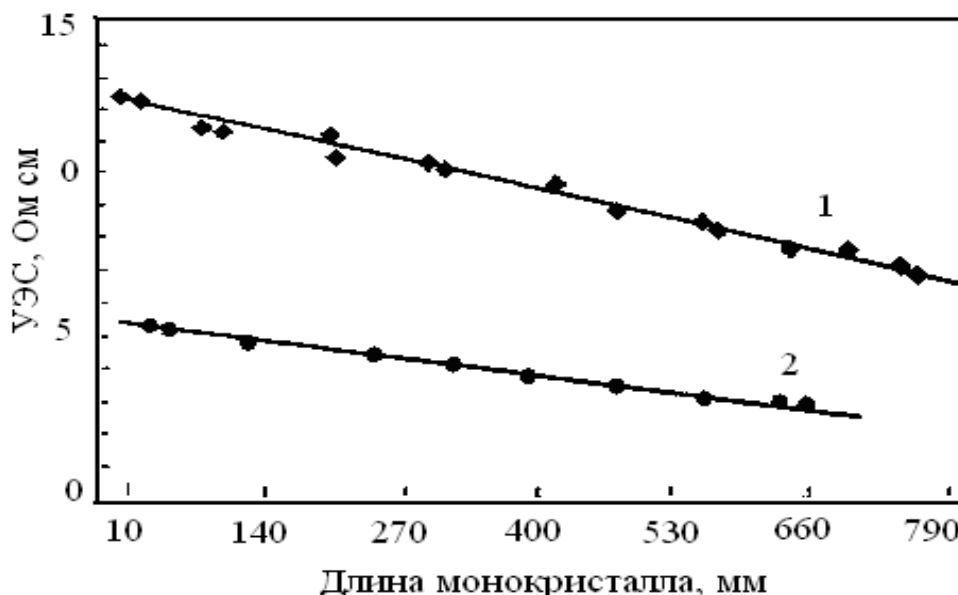
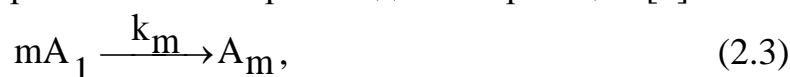


Рис.2.2. Характер распределения УЭС по длине монокристалла кремния, выращенного по методу Чохральского (1) и перекристаллизованного методом бестигельной зонной плавки (БЗП) (2), по данным [45].

Комплексообразование примесей.

Образование комплексов примеси может происходить по реакции [1]:



где

A – химический символ легирующей примеси;

m – число атомов примеси в комплексе (квазимолекуле);

k_m – константа скорости образования комплекса A_m ;

$$k_m = \frac{[A_m]}{[A_1]^m} \tag{2.4}$$

Полную концентрацию можно представить как

$$N = n_p + \sum_{m=2}^D A_m, \tag{2.5}$$

где

n_p – концентрация примеси, которая соответствует полностью ионизированному состоянию, $см^{-3}$;

D – максимальный уровень политропии.

Кинетическое уравнение образования комплекса A_m

$$\frac{dA_m}{dn} = -k_m \cdot A_1^m, \tag{2.6}$$

где

n – концентрация электрически неактивной примеси, $см^{-3}$.



Преобразование уравнения (1.6) с использованием реакции (1.3), можно выразить как

$$A_1 = \left[-\frac{k_m \cdot (1-m)}{m} \cdot (n - n_p) \right]^{\frac{1}{1-m}} \quad (2.7)$$

Подставляя уравнение (1.7) в выражение (1.5) с учетом (1.3), получим полную концентрацию примеси

$$N = n_p + \sum_{m=2}^D m \cdot \left[-\frac{k_m \cdot (1-m)}{m} \cdot (n - n_p) \right]^{\frac{1}{1-m}} \quad (2.8)$$

Для вычисления коэффициента k_m используется условие минимизации суммарной квадратичной невязки:

$$\Phi = \sum_{i=1}^L (c_i - N)^2 \Rightarrow \min, \quad (2.9)$$

где

$$c_i = N_A^{\text{факт}} - n_p, \quad (2.10)$$

где

$N_A^{\text{факт}}$ - фактическая концентрация примеси, см^{-3} .

Значения констант скоростей реакции k_m находятся из системы уравнений

$$\frac{\partial \Phi}{\partial k_m} = 0, m \in [1; D] \quad (2.11)$$

Для степени политропии $D=2, 3, 4$ при легировании кремния бором по данным [45], в соответствии с данным алгоритмом, были получены константы скоростей k_m образования комплексов B_2, B_3, B_4 : $k_2=7,88 \cdot 10^{-2}$, $k_3=1,25$, $k_4=1,05 \cdot 10^{-2}$ (комплексы, состоящие из 2, 3, 4 атомов бора соответственно).

1.3. Влияние режимов термической обработки на параметры монокристаллов кремния, легированного бором

Цель работы заключается в том, чтобы с помощью различных режимов термической обработки проследить процессы образования комплексов примесей бора в монокристаллах кремния.

Термическая обработка пластин была проведена в соответствии со следующими определенными режимами (табл. 3.1).



Таблица 3.1.

Режимы термической обработки пластин кремния

Группа пластин	Параметры пластин	Режим термообработки*, T _{отж} , °C	
		t _{выд} , 1 ч	t _{выд} , 5 ч
1	Si [B], D=100 мм, d= 1 мм	473	
2	Si [B], D=80 мм, d= 1 мм	580	
		900	

* для каждой группы пластин

Расчет выбранных температур производился с использованием уравнения Нернста по формуле 1.4.

Две группы пластин кремния, легированных бором, подвергались термической обработке при времени выдержки 1 и 5 ч. В ходе проведения термической обработки пластин кремния были получены следующие результаты (табл. 3.2, 3.3).

Таблица 3.2

Удельное электрическое сопротивление (ρ) пластин монокристаллического кремния до и после термической обработки, t_{выд}=1 ч

№	ρ ₀ , Ом·см	ρ, Ом·см		
		при следующих условиях термической обработки *		
		T=473 °C	T=580 °C	T=900 °C
1	29,007...31,590	38,616	33,086	35,081
		42,015	53,119	74,694
2	0,045...0,076	0,011	0,008	0,045
		0,015	0,008	0,045

* скорость нагрева термической печи 5 °C /мин.

Таблица 3.3

Удельное электрическое сопротивление (ρ) пластин монокристаллического кремния до и после термической обработки, t_{выд}=5 ч

№	ρ ₀ , Ом·см	ρ, Ом·см		
		при следующих условиях термической обработки *		
		T=473 °C	T=580 °C	T=900 °C
1	29,007...31,590	—	36,033	81,674
		49,448	82,943	113,265
2	0,045...0,076	0,015	0,012	0,226
		0,045	0,012	0,272

* Скорость нагрева термической печи 5 °C /мин.

Данные таблиц для удобства математически усреднялись, поведение примесей наглядно представлено на следующих рисунках.

Термическая обработка пластин монокристаллического кремния группы 1 (рис.3.1.) привела к увеличению ρ пластин, а соответственно к уменьшению концентрации носителей бора в кремнии. По всей вероятности происходит распад кремний - кислородных комплексов с образованием

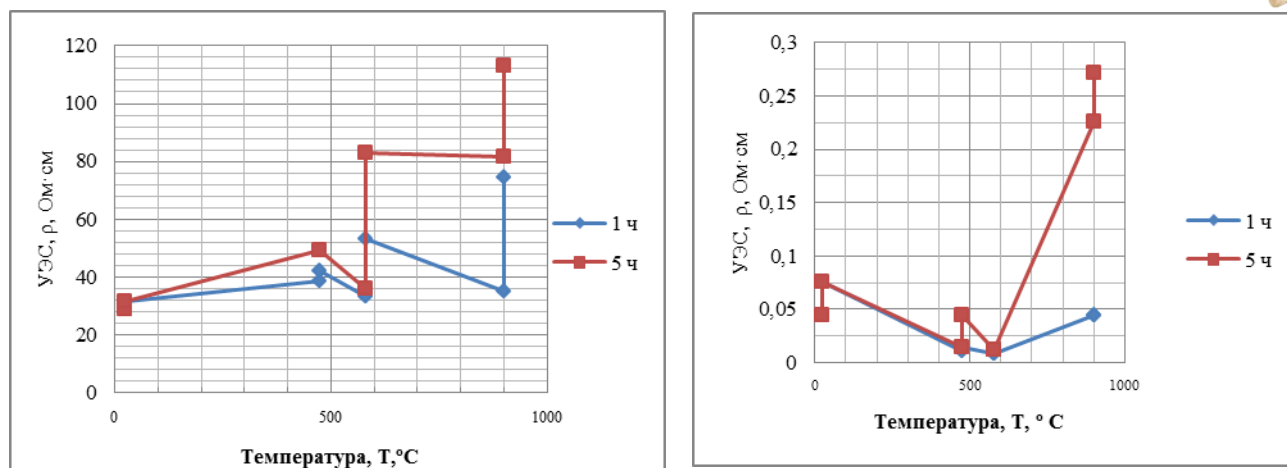


Рис.3.1. Зависимость $\rho(T)$ пластин монокристаллического кремния группы 1 и 2 соответственно.

модифицированного бора. Предположительно В остается в объеме монокристаллического кремния в виде стабильных борсодержащих комплексов. Комплексы бора могут быть достаточно устойчивыми (до 872 и выше). Известно [58], что при $T_{отж} = 300...700$ °C происходит образование кислородных агломератов. Кислород присутствует как в исходном монокристаллическом кремнии, так и эффективно вводится в ходе дальнейших высокотемпературных операций. Проведение термообработки пластин Si, легированных бором с $\rho = 30$ Ом·см в термической печи в воздушной атмосфере нецелесообразно (происходит попадание нежелательных частиц в объем монокристаллического кремния при взаимодействии с воздухом), вероятно происходит образование комплексов В-О, обладающие электрической нейтральностью. Поэтому рекомендуемой средой является вакуум или среда инертного газа.

Изменение ρ пластин группы 2 (рис.3.1) происходит скачкообразно. Наблюдается уменьшение ρ до 580 °C (распад нейтральных комплексов), а затем резкое увеличение ρ . Вероятно в области температур 580...900 °C происходит перестройка атомов примеси и матрицы с образованием высокотемпературных комплексов, которые имеют нейтральный характер.

1.4. Межпримесное взаимодействие в монокристаллах кремния

Примесный ион можно рассматривать погруженным в среду с диэлектрической проницаемостью ϵ . Если предположить, что имеет место ионизация атомов как примеси, так и кремния, то согласно закону Кулона два заряда будут взаимодействовать друг с другом в вакууме с силой F, величина которой пропорциональна произведению зарядов и обратно пропорциональна квадрату расстояния между ними [53,54].

Рассмотрим взаимодействие ионов между собой в среде вакуума и аргона, а также в среде расплавленного кремния ($\epsilon_{вакуума}=1$, $\epsilon_{аргона}=1,000554$, $\epsilon_{кремния}=11,7$).



Действие других сил в данном анализе не учитываются. Тогда сила кулоновского притяжения (отталкивания) определяется по формуле

$$F = \frac{\sigma_1 \sigma_2}{4\pi \pi_0 \epsilon^2}, \text{ Н} \tag{4.1}$$

где σ_1, σ_2 – заряды ионов, Кл;

ϵ - диэлектрическая проницаемость среды;

ϵ_0 - диэлектрическая постоянная, $8,85 \cdot 10^{-12}$ Кл²/(Н·м²);

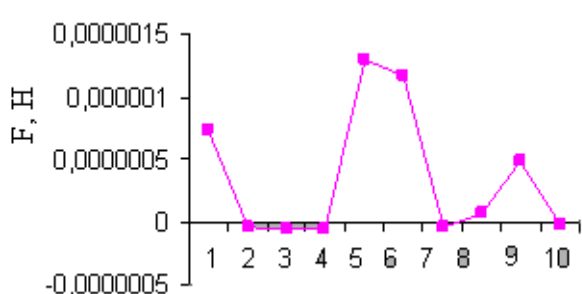
r - расстояние между атомами, м.

Ниже представлены варианты пар взятых ионов и значения силы кулоновского притяжения (отталкивания) в различных средах (табл.1.1), а также зависимость кулоновских сил (найденных по формуле 1.1) от вариантов пар ионов (рис.1.1). Вычисленные значения силы Кулона в вакууме и аргоне практически не отличаются, поэтому на рис.1.1 представлены только зависимости кулоновских сил от вариантов пар ионов в вакууме и расплаве кремния.

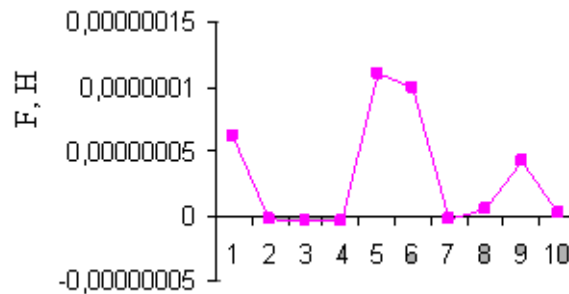
Таблица 4.1

Значение F для пар взаимодействующих ионов примесей

№	Пары ионов	F, Н	
		(вакуум, Ar)	Si (расплав)
1	Si ⁴⁺ B ³⁺	$0,744 \cdot 10^{-6}$	$0,63 \cdot 10^{-7}$
2	Si ⁴⁻ B ³⁺	$0,32 \cdot 10^{-7}$	$0,2 \cdot 10^{-8}$
3	Si ⁴⁺ O ²⁻	$0,56 \cdot 10^{-7}$	$0,4 \cdot 10^{-8}$
4	B ³⁺ O ²⁻	$0,54 \cdot 10^{-7}$	$0,4 \cdot 10^{-8}$
5	B ³⁺ B ³⁺	$0,129 \cdot 10^{-5}$	$0,11 \cdot 10^{-6}$
6	Si ⁴⁺ C ⁴⁻	$0,117 \cdot 10^{-5}$	$0,1 \cdot 10^{-6}$
7	Si ⁴⁻ C ⁴⁺	$0,45 \cdot 10^{-7}$	$0,3 \cdot 10^{-8}$
8	C ⁴⁺ O ²⁻	$0,72 \cdot 10^{-7}$	$0,6 \cdot 10^{-8}$
9	Si ⁴⁺ P ³⁺	$0,49 \cdot 10^{-6}$	$0,42 \cdot 10^{-7}$
10	Si ⁴⁻ P ³⁺	$0,29 \cdot 10^{-7}$	$0,2 \cdot 10^{-8}$



а)



б)

Рис. 4.1 - График зависимости силы кулоновского взаимодействия между ионами от вариантов пар ионов:
а) в вакууме; б) в расплаве кремния.



Также можно найти значения энергий связи, сумма которых по всем связям молекулы, удовлетворительно описывается одной валентной структурой [59].

Значения для одинарных связей можно приближенно оценить по соотношению, содержащему разности электроотрицательностей [60]

$$E(A-B) = \frac{1}{2} \{ E(A-A) + E(B-B) \} + 100 (x_A - x_B)^2 - 6.5 (x_A - x_B)^4, \text{кДж} \cdot \text{моль}^{-1} \quad (4.2)$$

где $E(A-A)$ – значение энергии связи для одинарной связи одного вещества, $\text{кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$;

$E(B-B)$ – значение энергии связи для одинарной связи другого вещества, $\text{кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$;

x_A, x_B – электроотрицательности элементов соответственно.

Используя данное соотношение, были вычислены значения энергий связи для следующих соединений: Si-B, Si-O, B-O, Si-P; для сравнения связей при их взаимодействии. Значения энергий связи составили (табл. 4.2.)

Таблица 4.2.

Значения энергий связи для следующих соединений

Соединения	Si – B	Si – O	B – O	Si – P	Si – Ga	Si – Sb
По данным [61], E, $\text{кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$	187...210	—	—	211	232	158
Определенные значения, E, $\text{кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$	209,98	159,71	376,81	210,95	—	—

По данным [61] P и Ga, а также B являются упрочняющими примесями в кремнии. Легирование кремния сурьмой разупрочняет Si. Кислород является упрочняющей примесью для бора. Следовательно, влияние P, Ga, B, O, Sb на объемную прочность кремния зависит от природы примеси и приводит к его упрочнению или разупрочнению.

1.5. Исследование термодинамических свойств монокристаллов кремния, легированного бором

Основой применения статистических законов термодинамики является изучение процессов теплового движения молекулярного и атомного хаоса. Статистические взаимодействия связаны с размещением структурных элементов по определенным позициям кристаллической решетки. Они в свою очередь оказывают влияние на *конфигурационную энтропию системы* [34]. Существует прямая связь энтропии и вероятности нахождения атома (молекулы) в каком-либо положении [14].

Тепловой эффект и изменение энтропии реакции в свою очередь зависит от температуры. Определение конфигурационной энтропии в зависимости от



степени легирования атомами примеси бора, а также с учетом параметра комплексообразования φ , проводили по следующему алгоритму.

Рассмотрим термодинамику взаимодействия только между ближайшими соседями, в нашем случае, между атомами кремния и бора. Вероятность какого-либо состояния системы – ω – представляет собой число размещений N_1 атомов первого компонента (N_{Si}) и N_2 атомов второго компонента (N_B) на $N_{1,2}=N_1+N_2$ атомных местах. Кристаллическая решетка содержит $N_{1,2}$ атомных мест, каждое из которых может быть занято лишь одним атомом [2].

Таблица 5.1

Исходные данные для разных вариантов легирования бором монокристаллов кремния

х/э	$N, \text{см}^{-3}$								
№	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Si	$5 \cdot 10^{22}$								
B	$1,5 \cdot 10^{12}$	$5 \cdot 10^{13}$	$7 \cdot 10^{14}$	$1,1 \cdot 10^{15}$	$1,23 \cdot 10^{16}$	$2,2 \cdot 10^{17}$	$1,5 \cdot 10^{18}$	$3,7 \cdot 10^{19}$	$6 \cdot 10^{20}$

Учитывая то, что концентрации атомов примеси бора относительно велики, величины вероятности, число способов смешивания будет огромным, поэтому для упрощения расчета провели соотношение $N_{Si}:N_B$ для различных вариантов легирования монокристаллов кремния (по данным табл. 5.2).

Таблица 5.2

Соотношение $N_{Si}:N_B$ для различных вариантов легирования монокристаллов кремния

№	1	2	3	4	5	6	7	8	9
N_{Si}/N_B	$3,33e^{10}$	$1 \cdot 10^9$	$7,14 \cdot 10^7$	$4,5 \cdot 10^7$	$4,1 \cdot 10^6$	$2,3 \cdot 10^5$	$3,33 \cdot 10^4$	1351,35	83,33

В то же время термодинамическая вероятность нахождения атомов в той или иной позиции кристаллической решетки тесно связана с конфигурационной (позиционной) энтропией – энтропией смешения.

В качестве примера применения статистического подхода остановимся на расчете конфигурационной энтропии монокристаллического кремния, легированного бором. Конфигурационная энтропия дается уравнением Больцмана [25]:

$$\Delta S = k \ln W = k \ln \frac{N!}{n!(N-n)!} = k [\ln N! - \ln n! - \ln(N-n)!] \quad (5.1)$$

где постоянная уравнения (4.2.1.) – постоянная Больцмана k равна $R/N_0 = 1,38042 \cdot 10^{-23}$ Дж·град⁻¹;

R – газовая постоянная, равная $8,3143$ Дж·моль⁻¹·град⁻¹;

N_0 – постоянная Авогадро, равная $6,024 \cdot 10^{23}$ [62].

Используя приближение Стирлинга $\ln x! = x \ln x - x$, избавляемся от факториалов [здесь и ниже N – число атомов А и примеси В, $(N - n)$ – число атомов А; $n \ll N$].



$$\text{Мольная доля атомов В } x_B = \frac{n}{N}.$$

$$\text{Мольная доля атомов А } x_A = (1 - x_B) = \frac{N - n}{N}.$$

Из уравнения (4.2.1) получаем

$$\Delta S = \kappa [N \text{Ln} N - n \text{Ln} n - (N - n) \text{Ln}(N - n)], \quad (5.2)$$

где

N – число узлов кристалла – сумма атомов А и В, см^{-3} ;

n – число атомов В, см^{-3} ;

$(N - n)$ – число атомов А, см^{-3} .

Так как $x_A = (1 - x_B)$,

где $x_B = \frac{n}{N}$ и $x_A = (1 - x_B) = \frac{N - n}{N}$,

$$\Delta S = -R \left[x_B \text{Ln} x_B + (1 - x_B) \text{Ln}(1 - x_B) \right] \quad (5.3)$$

Таблица 5.3

Значения конфигурационной энтропии при различных уровнях легирования примесей бора и фосфора

№	$N_B, \text{см}^{-3}$	x_B	$\Delta S_{\text{конф}},$ кДж/моль	$\Delta S_{\text{конф}}$ при $\varphi=0,3,$ кДж/моль	$\Delta S_{\text{конф}}$ при $\varphi=0,6,$ кДж/моль
1	$N_1=1,5 \cdot 10^{12}$	$3e^{-11}$	$6,29e^{-9}$	$1,6e^{-10}$	$2,09e^{-11}$
2	$N_2=5 \cdot 10^{13}$	$1e^{-9}$	$1,8e^{-7}$	$5,35e^{-9}$	$6,96e^{-10}$
3	$N_3=7 \cdot 10^{14}$	$1,4e^{-8}$	$2,22e^{-6}$	$7,49e^{-8}$	$9,74e^{-9}$
4	$N_4=1,1 \cdot 10^{15}$	$2,2e^{-8}$	$3,4e^{-6}$	$1,18e^{-7}$	$1,53e^{-8}$
5	$N_5=1,23 \cdot 10^{16}$	$2,49e^{-7}$	$3,36e^{-5}$	$1,34e^{-6}$	$1,74e^{-7}$
6	$N_6=2,2 \cdot 10^{17}$	$4,39e^{-6}$	$4,87e^{-4}$	$2,35e^{-5}$	$3,06e^{-6}$
7	$N_7=1,5 \cdot 10^{18}$	$2,99e^{-5}$	0,0028	$1,6e^{-4}$	$2,09e^{-5}$
8	$N_8=3,7 \cdot 10^{19}$	$7,39e^{-4}$	0,05	0,004	$5,29e^{-4}$
9	$N_9=6 \cdot 10^{20}$	0,0118	1,36	0,08	0,02

Исходя из данных табл. 5.3 по уравнению (5.3) была рассчитана конфигурационная энтропия S для различных уровней легирования. Получена зависимость конфигурационной энтропии от степени легирования атомов примеси. Зависимость $S(x_B)$ показана на рис.2.1 (кривая 1).

На примере бора известно [45], что по мере возрастания концентрации в монокристалле кремния от $1,1 \cdot 10^{15}$ вплоть до предела растворимости $6 \cdot 10^{20} \text{см}^{-3}$ возрастает доля этой примеси в электрически неактивной форме, т.е. происходит образование комплексов. И значительная часть примеси бора в кремнии 30...60% находится в неактивном состоянии. Поэтому была рассчитана конфигурационная энтропия с учетом φ -параметра комплексообразования. В данном случае параметр φ отражает объемную долю в расплаве группировок атомов с преимущественно ковалентным типом связи. Расчетная формула конфигурационной энтропии с учетом образования



комплексов примеси будет выглядеть так:

$$\Delta S_{\text{конф}} = -R \left[x_A(1-\varphi) \ln \frac{x_A(1-\varphi)}{x_A(1-\varphi) + x_B} + x_B \ln \frac{x_B}{x_A(1-\varphi) + x_B} \right] \quad (5.4)$$

Наиболее вероятно, что выражение (5.3) отражает общий случай нахождения величины ΔS . В частности, для $\varphi=0$ соотношение (5.3) принимает вид (5.2), т.е. отражает энтропию смешения идеальных частиц. Если же $\varphi=1$, то в соответствии с выражением (5.4) $\Delta S=0$, т.е. при условии полного блокирования взаимодействующих атомов, имеет место нулевая энтропия позиционного разупорядочения. Принимая параметр комплексообразования φ равным 0,3 и 0,6 (30 и 60%), провели вычисления по формуле (2.4), была составлена таблица результатов, вычисленных значений конфигурационной энтропии и мольной доли атомов примеси, построены кривая 2 и кривая 3 соответственно (рис. 5.1, кривая 2 и кривая 3).

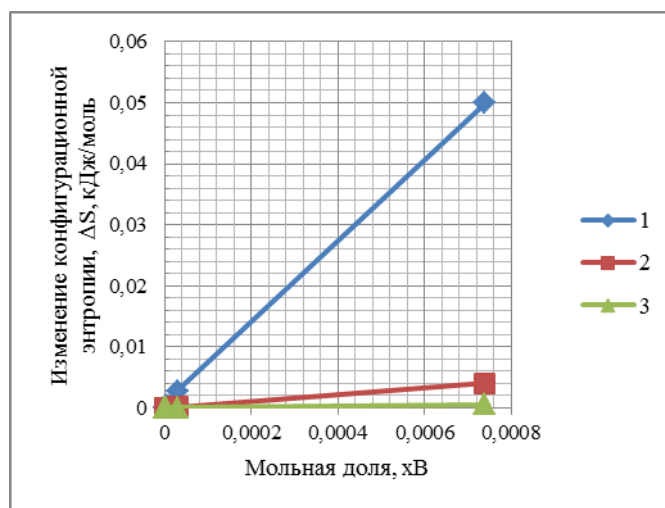


Рис. 5.1. Зависимость конфигурационной энтропии от мольной доли примеси В в монокристаллическом кремнии (кривая 1); зависимость конфигурационной энтропии от мольной доли атомов примеси В при $\varphi=0,3$ (кривая 2); зависимость конфигурационной энтропии от мольной доли примеси В при $\varphi=0,6$ (кривая 3).

Изменение изобарно-изотермического потенциала или свободной энергии выражают через тепловой эффект и изменение энтропии [63]:

$$\Delta G = \Delta H - \Delta S \cdot T \quad (5.5)$$

где

ΔG - свободная энергия, кДж/моль;

ΔH - энтальпия системы, кДж/моль;

ΔS - энтропия системы, кДж/моль;

T - температура, °С.

Определение значения свободной энергии Гиббса проводили для разных вариантов легирования кремния бором при температурах 473 °С, 580 °С и 900



°С (принимаем для бора в кремнии $\Delta H=2,03$ эВ; значение ΔS по данным табл.2.3).

Таблица 5.4

Значения энергии Гиббса при разных уровнях легирования бором в монокристаллах кремния

№	$N, \text{ см}^{-3}$	$T, \text{ }^\circ\text{C}$	$\Delta G, \text{ кДж/моль}$	$\Delta G, \text{ при } \varphi=0,3, \text{ кДж/моль}$	$\Delta G, \text{ при } \varphi=0,6, \text{ кДж/моль}$
1	$N_1=1,5 \cdot 10^{12}$	473	196,1329	196,1329	196,1329
		580	196,1329	196,1329	196,1329
		900	196,1329	196,1329	196,1329
2	$N_2=5 \cdot 10^{13}$	473	196,1329	196,1329	196,1329
		580	196,1328	196,1329	196,1329
		900	196,1328	196,1329	196,1329
3	$N_3=7 \cdot 10^{14}$	473	196,1319	196,1329	196,1329
		580	196,1317	196,1329	196,1329
		900	196,131	196,1329	196,1329
4	$N_4=1,1 \cdot 10^{15}$	473	196,1313	196,1329	196,1329
		580	196,131	196,1329	196,1329
		900	196,1299	196,1328	196,1329
5	$N_5=1,23 \cdot 10^{16}$	473	196,117	196,1323	196,1329
		580	196,1135	196,132	196,1328
		900	196,1027	196,1317	196,1328
6	$N_6=2,2 \cdot 10^{17}$	473	195,903	196,121	196,135
		580	195,8505	196,1193	196,131
		900	195,6947	196,1118	196,1302
7	$N_7=1,5 \cdot 10^{18}$	473	194,8086	196,057	196,123
		580	194,509	196,0402	196,1208
		900	193,613	195,989	196,1141
8	$N_8=3,7 \cdot 10^{19}$	473	172,482	194,241	195,8827
		580	167,133	193,813	195,826
		900	151,133	192,533	195,6569
9	$N_9=6 \cdot 10^{20}$	473	-447,147	158,293	186,673
		580	-592,667	149,733	184,533
		900	-1027,867	124,133	178,133

Используя результаты табл. 5.4 были построены следующие зависимости свободной энергии Гиббса от вариантов уровня легирования

Результаты исследований термодинамики протекания реакций взаимодействия примесей бора и фосфора в монокристаллах кремния показали, что в случае $\Delta G > 0$ – без внешнего подвода энергии процесс невозможен (процесс может протекать произвольно только в обратном направлении) [64]. При $\Delta G < 0$ протекание процесса возможно, но при реальных условиях такой процесс не идет. Таким образом при разных степенях легирования примесями бора монокристаллов кремния происходит изменение свободной энергии Гиббса, которая зависит от температуры и дефектов (комплексообразования). Увеличение комплексообразования примесей бора от 30% до 60% увеличивает энергию Гиббса (изменение величины ΔG наблюдается начиная с концентрации

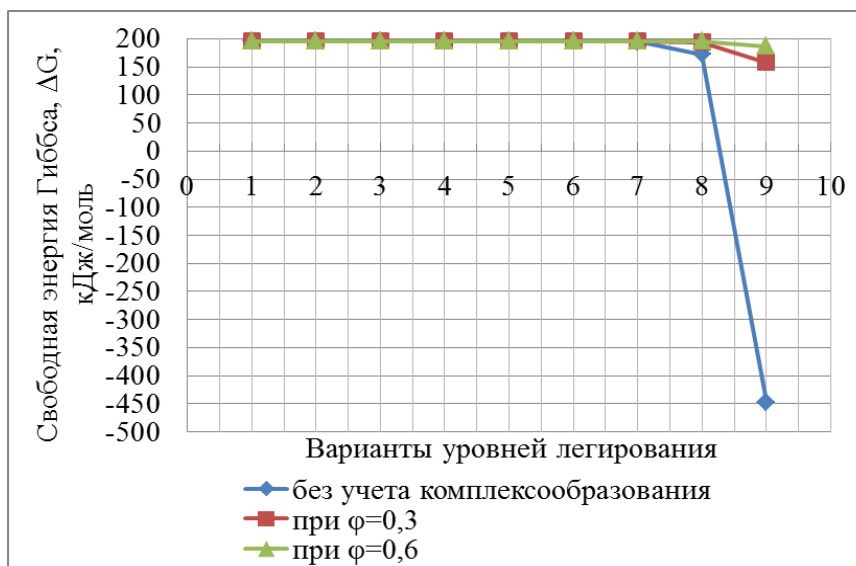


Рис. 5.2. Изменение энергии Гиббса при разных уровнях легирования бором (температура 473 °С), с учетом φ-параметра комплексообразования

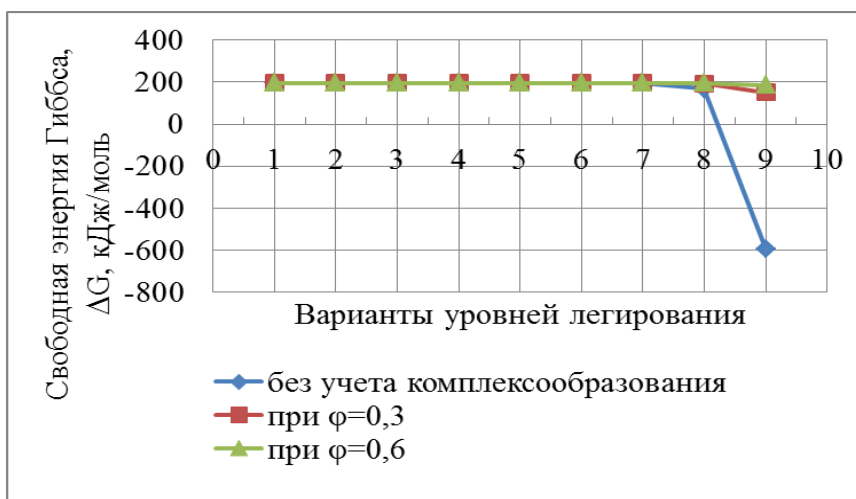


Рис. 5.3. Изменение энергии Гиббса при разных уровнях легирования бором (температура 580 °С), с учетом φ-параметра комплексообразования

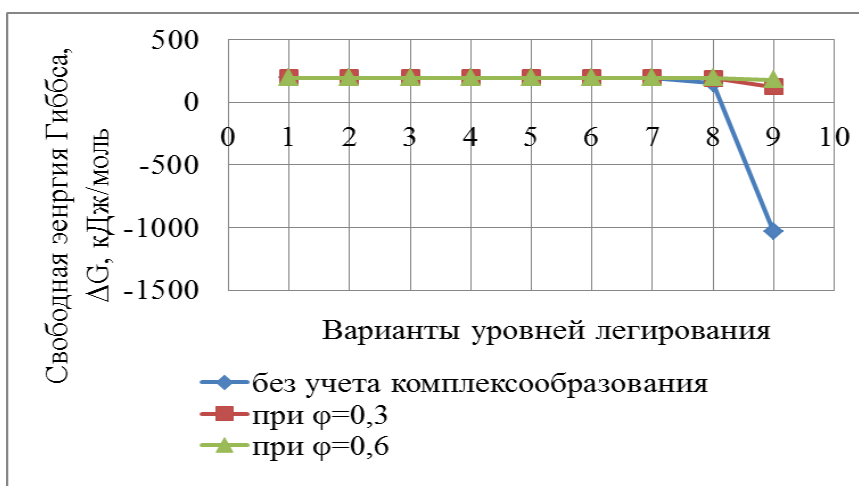


Рис. 5.4. Изменение энергии Гиббса при разных уровнях легирования бором (температура 900 °С), с учетом φ-параметра комплексообразования



бора равной $1,1 \cdot 10^{15}$), имеет влияние температура на протекание процесса (увеличение температуры уменьшает значение ΔG). При небольших степенях легирования примесями явного влияния на процесс нет.

1.6. Анализ результатов термической обработки монокристаллов кремния, легированных бором, с построением математической модели планирования эксперимента

В процессе дальнейшего использования выращенные монокристаллы кремния подвергаются различным термическим обработкам, которые изменяют характеристики монокристаллического кремния. Поэтому исследование поведения примесей в объеме монокристаллического кремния является важным для понимания процессов дефектообразования в объеме монокристалла.

В объеме монокристаллического кремния независимо от степени легирования и типа примеси имеются дефекты, которые значительно изменяют свойства монокристаллов. По данным [52], при последующей термической обработке монокристаллов кремния, легированных бором, наблюдается увеличение времени жизни неравновесных носителей заряда, и это объяснялось вероятным освобождением фоновой примеси кислорода из примесного комплекса В-О.

В основу данного научного подхода заложены оптимизация технологических параметров с применением математического моделирования. Использование полученной модели позволит проанализировать влияние внешних факторов на структуру, а также позволит определить оптимальные условия для выполнения технологического процесса термической обработки.

Задача состоит в том, чтобы выбрать число и расположение в факторном пространстве экспериментальных точек так, чтобы при минимуме точек получить информацию, необходимую и достаточную для планирования следующего шага.

Под планированием данного эксперимента будем понимать всю совокупность приемов и методов, которые позволят получить информацию для исследования и оптимизации процессов.

Чтобы проследить изменение удельного сопротивления ρ под влиянием T (температуры) и $t_{\text{выд}}$ (время выдержки) на основе данных работы [65] была построена матрица планирования эксперимента с последующим построением математической модели для двух серий опытов (табл. 6.1, 6.2). За основу принимали изменение двух факторов: x_1 – температуры выдержки образцов пластин, °С ($T=473, 580, 900$ °С); x_2 – времени выдержки при x_1 , ч ($t_{\text{выд}}=1, 5$ ч) при значениях УЭС, полученных при данных условиях со степенью комплексообразования 0,3 и 0,6.

Каждый проводимый эксперимент содержит элемент неопределенности по причине ограниченности экспериментального материала. Постановка опытов не дает полностью совпадающих результатов, потому что существует вероятность ошибки опыта (ошибки воспроизводимости) [66]. Для этого производилось



усреднение всех результатов (табл. 1, 2):

$$\bar{y} = \frac{y^I + y^{II} + \dots + y^n}{n} = \frac{\sum_1^n y_q}{n}, \tag{6.1}$$

где \bar{y} – среднее арифметическое результатов;

y^I, y^{II}, y^n – результаты опытов; y_q – результат отдельного опыта; n – количество опытов.

Отклонение результата любого опыта от \bar{y} можно представить как разность $y_q - \bar{y}$. Наличие отклонения свидетельствует об изменчивости опытов.

Для измерения изменчивости использовали дисперсию, как среднее значение квадрата отклонений величины от ее значения - S_i^2 , где $(n-1)$ – число степеней свободы, равное количеству опытов минус единица.

Таблица 6.1

Матрица планирования с различным числом опытов 2^{3-1}
(1-ая серия опытов) (опыты 1-12)

j	y^I	y^{II}	y^{III}	\bar{y}	Δy^I	Δy^{II}	Δy^{III}	$(\Delta y^I)^2$	$(\Delta y^{II})^2$	$(\Delta y^{III})^2$	f	S^2
1	38,616	33,086	35,081	35,594	3,022	-2,508	-0,513	9,132	6,29	0,263	2	7,843
2	42,015	53,119	74,694	56,609	-14,594	-3,49	18,085	212,98	12,18	327,067	2	276,114
3	–	36,033	81,674	58,854	–	-22,821	22,82	–	520,798	520,752	1	1041,55
4	49,448	82,943	113,265	81,885	-32,437	1,058	31,38	1052,158	1,119	984,704	2	1018,991

Таблица 6.2

Матрица планирования с различным числом опытов 2^{3-1}
(2-ая серия опытов) (опыты 13-24)

j	y^I	y^{II}	y^{III}	\bar{y}	Δy^I	Δy^{II}	Δy^{III}	$(\Delta y^I)^2$	$(\Delta y^{II})^2$	$(\Delta y^{III})^2$	f	S^2
1	0,011	0,008	0,045	0,021	-0,01	-0,013	0,024	0,0001	0,000169	0,000576	2	0,0004225
2	0,015	0,008	0,045	0,023	-0,008	-0,015	0,022	0,000064	0,000225	0,000484	2	0,0003865
3	0,015	0,012	0,226	0,084	-0,069	-0,072	0,142	0,004761	0,005184	0,0202	2	0,0150725
4	0,045	0,012	0,272	0,109	-0,064	-0,097	0,163	0,004096	0,009409	0,0266	2	0,0200525

Матрица планирования состоит из серии опытов, поэтому была необходимость осуществить проверку опытов на однородность дисперсий с помощью статистических критериев. Т.к. сравниваемое количество дисперсий больше двух и одна дисперсия значительно превышает другие используем проверки на критерии Кохрена (G) и Стьюдента (t).

Критерий Кохрена:

$$G = \frac{S_{max}^2}{\sum_1^n S_i^2} \tag{6.2}$$

Таблица 6.3

Результаты проверки на критерий Кохрена

S_i^2	G	S_i^2	G
7,842	0,003	0,00042	0,012
276,113	0,118	0,00038	0,011
1041,55	0,444	0,015072	0,419
1018,991	0,434	0,020052	0,558
по данным табл.3.1		по данным табл. 3.2	



Полученное значение критерия Кохрена (при $S_i^2 \max = 1041,55$) 0,444 не превышает табличного. Табличное значение критерия Кохрена при данном количестве опытов $G_{\text{табл}} = 0,6841$. Во второй группе данных – $G = 0,558$ (при $S_i^2 \max = 0,020052$), меньше $G_{\text{табл}} = 0,6841$ (при $f_2 = N = 4$ и $f_1 = n - 1 = 4 - 1 = 3$). Поскольку экспериментальный критерий Кохрена не превышает значения табличного, предположение об однородности дисперсий подтверждается для двух серии опытов.

Анализ опытов по критерию Стьюдента привел к положительному результату, все экспериментальные данные воспроизводимы, «брака» (несоответствия) не наблюдается. Все полученные данные оказались < табличного $t = 4,303$. Поэтому данные были подвержены анализу с применением функции отклика при перемене факторов, влияющих на изменение этих данных.

Таблица 6.4

Функция отклика в зависимости от изменяемости факторов эксперимента

№ п/п	Факторы					x1x2	Функция отклика, у
	код	x ₁	код	x ₂	x ₃ *		
1	-	473	-	1	30	+	38,616
2	+	473	-	5	30	-	-
3	-	473	+	1	60	-	42,015
4	+	473	+	5	60	+	49,448
5	-	580	-	1	30	+	33,086
6	+	580	-	5	30	-	36,033
7	-	580	+	1	60	-	53,119
8	+	580	+	5	60	+	82,943
9	-	900	-	1	30	+	35,081
10	+	900	-	5	30	-	81,674
11	-	900	+	1	60	-	74,694
12	+	900	+	5	60	+	113,265
среднее							58,17945
13	-	473	-	1	30	+	0,011
14	+	473	-	5	30	-	0,015
15	-	473	+	1	60	-	0,015
16	+	473	+	5	60	+	0,045
17	-	580	-	1	30	+	0,008
18	+	580	-	5	30	-	0,008
19	-	580	+	1	60	-	0,012
20	+	580	+	5	60	+	0,012
21	-	900	-	1	30	+	0,045
22	+	900	-	5	30	-	0,45
23	-	900	+	1	60	-	0,226
24	+	900	+	5	60	+	0,272
среднее							0,09325

x₃* - параметр комплексообразования, %; условный фактор, в вычислении участия не принимает.



В результате математических вычислений получены следующие математические модели:

b_1	86,752	для значений № 1-12	
b_2	190,994		
y	-219,567	при $x_1=(+1)$ и $x_2=(+1)$	$y=b_0-b_1x_1-b_2x_2$
y	335,9255	при $x_1=(-1)$ и $x_2=(-1)$	$y=b_0+b_1x_1+b_2x_2$
b_{12}	5,900364		
Уреальн	-225,467	при $x_1=(+1)$ и $x_2=(+1)$	$y=b_0-b_1x_1-b_2x_2-b_{12}x_1x_2$
Уреальн	341,8258	при $x_1=(-1)$ и $x_2=(-1)$	$y=b_0+b_1x_1+b_2x_2+b_{12}x_1x_2$

b_1	0,485	для значений № 13-24	
b_2	0,045		
y	-0,43675	при $x_1=(+1)$ и $x_2=(+1)$	$y=b_0-b_1x_1-b_2x_2$
y	0,62325	при $x_1=(-1)$ и $x_2=(-1)$	$y=b_0+b_1x_1+b_2x_2$
b_{12}	-0,02775		
Уреальн	-0,409	при $x_1=(+1)$ и $x_2=(+1)$	$y=b_0-b_1x_1-b_2x_2-b_{12}x_1x_2$
Уреальн	0,5955	при $x_1=(-1)$ и $x_2=(-1)$	$y=b_0+b_1x_1+b_2x_2+b_{12}x_1x_2$

Коэффициент при переменных указывает на силу влияния факторов. Чем больше коэффициент по абсолютной величине, тем больше влияние на эксперимент оказывает данный фактор. Знак «+» говорит о том, что параметр оптимизации увеличивается с увеличением фактора, минус – наоборот.

Выводы

- 1) Взаимодействия атомов примесей бора с атомами кремния, а также между собой приводят к образованию комплексов.
- 2) Помимо взаимодействия атомов бора с атомами кремния и между собой, происходят взаимодействия бора с кислородом, которые являются обратимыми и приводят к образованию электрически нейтрального комплекса.
- 3) Образование примесных комплексов в полной мере зависит от природы самих примесей (электроотрицательности, радиусов самих ионов и т.д.).
- 4) Проведенные эксперименты и расчеты показали, что при выращивании промышленных монокристаллов кремния, легированных бором $\geq 1,1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, весьма существенная его часть (от 30 до 60%) находится в электрически неактивном состоянии. Таким образом, данные очевидно свидетельствуют о присутствии в расплаве кремния комплексов из однородных примесей.
- 5) Полученные величины констант скоростей образования комплексов показали, что наиболее «эффективнее» будет происходить образование комплекса примеси бора, состоящего из трех атомов. Константа скорости k_m образования комплексов составила $k_3=1,25$.
- 6) Термическая обработка монокристаллов кремния приводит к изменению свойств в зависимости от температуры, времени выдержки пластин



и среды термической печи. Увеличение времени выдержки термической обработки пластин монокристаллического кремния в зависимости от увеличения температуры приводит к увеличению УЭС. Время выдержки 1ч приводит в интервале температур 473...580 °С к уменьшению, а с увеличением Т к увеличению УЭС до 16%. При увеличении температуры при времени выдержки 5ч наблюдается увеличение УЭС от 60% до несколько порядков выше.

7) В зависимости от пар ионов наиболее вероятно образование пар ионов ($\text{Si}^{4+}\text{O}^{2-}$), значение F для данной пары взаимодействующих ионов примесей составляет $0,56 \cdot 10^{-7}$ Н. Образование пары ионов примеси бора ($\text{B}^{3+}\text{B}^{3+}$) менее вероятно, но это наблюдается с силой взаимодействия $F=0,129 \cdot 10^{-5}$ Н. Взаимодействие примесей зависит от среды, в которой они находятся. В расплаве кремния значения F для пар ионов на порядок меньше чем в среде вакуума и инертных газов.

8) Результаты оценки энергий связи для одинарной связи показали, что наибольшим значением энергии связи обладает соединение В – О, $E=376,81$ кДж·моль⁻¹.

9) Величина термодинамической вероятности нахождения атомов в определенных местах кристаллической решетки показала, что с ростом уровня легирования монокристаллов Si примесью В, скачкообразно растет и число способов смешения атомов.

10) Полученная зависимость конфигурационной энтропии от мольной доли атомов примеси, еще раз подтвердила, что с ростом уровня легирования монокристаллического кремния увеличивается значение конфигурационной энтропии. Параметр комплексообразования ϕ позволил достаточно оценить конфигурационную энтропию системы. Наблюдается значительное ее понижение, что говорит о том, что дефекты в виде комплексов примеси с увеличением их числа до 60% уменьшают значение $\Delta S_{\text{конф}}$.

11) Увеличение комплексообразования примесей бора от 30% до 60% увеличивает энергию Гиббса (изменение величины ΔG наблюдается начиная с концентрации бора равной $1,1 \cdot 10^{15}$ см⁻³). Особое влияние оказывает температура на протекание процесса (увеличение температуры уменьшает значение ΔG). Легирование примесью бора до $1,1 \cdot 10^{15}$ см⁻³ не приводит к значительному изменению значений ΔG .

12) Построение математической модели на основе данных термической обработки позволило выяснить, что оптимальными для ведения процесса термической обработки являются уменьшение времени и Т выдержки монокристаллов. Оптимальными, по результатам исследования, являются 1ч и 580 °С (с учетом изменения УЭС при разных Т).