

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«ПЕНЗЕНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Факультет
информационных технологий
и электроники
наименование факультета

Кафедра
Нано – и микроэлектроника
наименование кафедры

Направление подготовки 11.03.04. Электроника и нанoeлектроника
код и наименование

Профиль «Микроэлектроника и твердотельная электроника»
наименование профиля

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

ПензГУ 02. 11.03.04. 017 ПЗ
обозначение, присваиваемое кафедрой

на тему

Расчёт равновесий в полупроводниковой системе «кремний – мышьяк»
тема бакалаврской работы

Студент группы 21ПД1
номер группы

Хонин 09.06.25
подпись, дата

Хонин М.И.
фамилия, иниц.

Руководитель зав. кафедрой
должность наименование организации

Пронин 9.06.25
подпись, дата

Пронин И.А.
фамилия, иниц.

Нормоконтролер ст. преподаватель
должность

Рыжова 12.06.25
подпись, дата

Рыжова Т.Н.
фамилия, иниц.

Работа допущена к защите в ГЭК (протокол заседания кафедры от 9.06.25 № 10)

Заведующий кафедрой

Пронин 9.06.25
подпись, дата

Пронин И.А.
фамилия, иниц.

Работа защищена с оценкой хор. (протокол ГЭК от 17.06.25 № 5)

Секретарь ГЭК

Вольсков 17.06.25
подпись, дата

Вольсков А.А.
фамилия, иниц.

РЕФЕРАТ

Пояснительная записка состоит из 69 страниц, содержит 3 рисунка, список использованных источников из 52 наименований и 3 приложений.

Ключевые слова: кремний, мышьяк, фазовые равновесия, легирование, спинодальный распад, полупроводниковая электроника, термодинамическое моделирование.

Цель работы: исследование фазовых равновесий в системе «кремний — мышьяк» методами термодинамического моделирования для оптимизации процессов легирования в полупроводниковых технологиях.

Задачи:

1. Провести анализ литературных данных по равновесиям в системе Si-As, включая растворимость мышьяка, механизмы деактивации и методы расчёта фазовых диаграмм.
2. Выполнить расчёт равновесия «твёрдая фаза — жидкая фаза» с построением кривых ликвидуса и солидуса.
3. Рассчитать и проанализировать кривую спинодали для определения условий устойчивости твёрдого раствора мышьяка в кремнии.
4. Оценить влияние термодинамических параметров на процессы легирования и образование дефектов.

Актуальность работы обусловлена широким применением мышьяка в качестве легирующей примеси в кремнии для создания n-типа проводимости. Понимание фазовых равновесий и спинодального распада необходимо для контроля концентрации примесей, минимизации дефектов и повышения эффективности полупроводниковых приборов, особенно в нанoeлектронике.

Объект исследования: система «кремний — мышьяк», её термодинамические свойства и фазовые превращения.

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						2
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	4
1 Литературный обзор по теме равновесий в полупроводниковой системе «кремний – мышьяк»	5
1.1 Общие сведения о полупроводниковых системах и их легировании	6
1.2 Теоретические и экспериментальные исследования системы «кремний – мышьяк»	19
1.3 Методы расчёта фазовых равновесий и спинодального распада	25
2 Расчёт равновесия «твёрдая фаза – жидкая фаза» в системе «кремний – мышьяк»	32
3 Расчёт и анализ кривой спинодали в системе «кремний – мышьяк»	36
4 Безопасность жизнедеятельности в полупроводниковой промышленности	40
4.1 Химическая безопасность	40
4.2 Электрическая безопасность	41
4.3 Термическая безопасность	43
4.4 Радиационная безопасность	44
4.5 Безопасность в чистых помещениях	44
Заключение	46
Список использованных источников	47
Приложение А. Задание на выпускную квалификационную работу	52
Приложение Б. Заявление и протокол проверки ВКР на оригинальность в системе «Антиплагиат.ВУЗ»	56
Приложение В. Презентация ВКР	59

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						3
Изм.	Лист	№ докум	Подп.	Дата		

ВВЕДЕНИЕ

Система «кремний – мышьяк» играет большую роль в полупроводниковой электронике, поскольку мышьяк широко используется в качестве легирующей примеси для создания *n*-типа проводимости в кремнии. Контроль концентрации примесей и их распределения в кристаллической решётке кремния является важной задачей, определяющей электрофизические свойства материала.

Для оптимизации технологических процессов, таких как диффузия и активация примесей, необходимо точное моделирование равновесий в данной системе, включая расчёт фазовых диаграмм, энергий образования дефектов и растворимости мышьяка в кремнии.

Целью данной работы является комплексное исследование фазовых равновесий в системе «кремний – мышьяк» методами термодинамического моделирования. Особое внимание уделяется анализу кривой спинодали.

Актуальность темы определяется потребностями современной микроэлектроники в точном контроле параметров легированных полупроводниковых материалов. Понимание термодинамических закономерностей в системе «кремний – мышьяк» особенно важно при создании приборов нанoeлектроники, где даже незначительные отклонения в составе и структуре материала могут существенно влиять на характеристики устройств.

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ				
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата	Введение	Лит.	Лист	Листов	
Разраб.		Хонин М.И.							
Пров.		Пронин И.А.		9.06.25			4	69	
						Гр. 21ПД1			
Н.контр		Рыжова Т.Н.		11.06.25					
Утв.									

1 Литературный обзор по теме равновесий в полупроводниковой системе «кремний – мышьяк»

Система кремний-мышьяк представляет значительный интерес для современной электроники, поскольку мышьяк является одной из основных донорных примесей, используемых для создания *n*-типных областей в кремниевых устройствах. Понимание равновесных состояний в этой системе необходимо для контроля процессов легирования и обеспечения стабильных характеристик полупроводниковых приборов.

Фазовые равновесия в системе Si-As характеризуются ограниченной взаимной растворимостью компонентов. При высоких температурах, близких к температуре плавления кремния (1414°C), растворимость мышьяка достигает максимальных значений порядка 10^{21} см^{-3} . Однако при понижении температуры равновесная растворимость резко уменьшается, что приводит к выпадению избыточного мышьяка в виде вторичных фаз или образованию кластеров. Это явление необходимо учитывать при разработке технологических процессов, так как оно может существенно влиять на электронные свойства материала.

Особый практический интерес представляет поведение мышьяка в кремнии при различных температурных режимах. В процессе высокотемпературного отжига происходит активация имплантированных атомов As и их распределение по кристаллической решетке. При этом важную роль играют диффузионные процессы, которые определяют конечный профиль распределения примеси. Следует отметить, что диффузия мышьяка в кремнии имеет сложный характер и зависит от концентрации: при высоких уровнях легирования наблюдается ускорение диффузионных процессов из-за взаимодействия между атомами примеси.

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ			
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата	Литературный обзор по теме равновесий в полупроводниковой системе «кремний – мышьяк»	Лит.	Лист	Листов
Разраб.		Хонин М.И.					5	69
Пров.		Пронин И.А.		06.25.11				
Н.контр		Рыжова Т.Н.		11.06.15				
Утв.						Гр. 21ПД1		

Технологические аспекты использования системы Si-As включают несколько ключевых моментов.

Во-первых, необходимо тщательно контролировать температурные режимы отжига для достижения оптимального распределения примеси.

Во-вторых, важно учитывать возможное образование дефектов при высоких концентрациях мышьяка.

В-третьих, при проектировании устройств следует принимать во внимание изменение электронных свойств кремния в зависимости от концентрации и распределения донорной примеси.

Современные исследования в этой области направлены на решение нескольких актуальных задач:

1. Разработка более точных моделей, описывающих поведение мышьяка в кремнии при различных температурных воздействиях.
2. Изучение влияния наноразмерных эффектов на процессы легирования и перераспределения примеси.
3. Оптимизация технологических процессов для создания устройств с улучшенными характеристиками.

Перспективы дальнейших исследований связаны с развитием методов компьютерного моделирования, позволяющих более точно предсказывать поведение системы Si-As при различных условиях. Особое внимание уделяется изучению процессов на атомном уровне, что становится возможным благодаря развитию современных аналитических методов. Эти исследования имеют важное прикладное значение для совершенствования технологий производства полупроводниковых приборов и создания новых поколений электронных устройств.

1.1 Общие сведения о полупроводниковых системах и их легировании

Современное общество невозможно представить без электронных технологий, и их стремительный прогресс в последние десятилетия стал достижим лишь благодаря фундаментальному изучению полупроводников (*semiconductor*

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		6

materials) и совершенствованию методов точного управления их электрофизическими характеристиками

При производстве полупроводников, легирование — это намеренное введение примесей в собственный (нелегированный) полупроводник с целью изменения его электрических, оптических и структурных свойств. Легированный материал называется примесным полупроводником.

Небольшое количество легирующих атомов может изменить способность полупроводника проводить электричество. Если на 100 миллионов собственных атомов приходится один легирующий атом, то легирование считается низким или лёгким.

Если добавляется гораздо больше легирующих атомов, порядка одного на десять тысяч атомов, то легирование считается высоким или тяжёлым. Это часто обозначается как n^+ для легирования n -типа или p^+ для легирования p -типа.

Полупроводник, легированный до таких высоких уровней, что он действует скорее как проводник, чем как полупроводник, называется вырожденным полупроводником. Полупроводник можно считать полупроводником i типа, если в него были легированы равные количества p и n .

В то время как проводники (*conductors*) демонстрируют стабильно высокую электропроводность, обусловленную высокой концентрацией свободных зарядов, а диэлектрики (*dielectrics*) практически не проводят ток из-за значительной ширины запрещённой зоны, полупроводники занимают особое положение, сочетая свойства этих двух классов материалов [1].

Главной отличительной характеристикой полупроводников является способность изменять удельную электропроводность (*electrical conductivity*) в чрезвычайно широком диапазоне — на несколько порядков величины — под влиянием внешних воздействий. Среди основных управляющих факторов следует выделить:

- температурные изменения;
- уровень освещённости;

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						7
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

- воздействие электрических и магнитных полей;
- контролируемое введение примесных атомов (*controlled impurity introduction*), или легирование, что имеет особое значение для микроэлектронных технологий.

Уникальная способность к управлению проводимостью (*tunability of conductivity*) составляет основу всех активных компонентов современной микроэлектроники.

Эта особенность проявляется на всех уровнях - от простейших *p-n*-переходов и транзисторов, выполняющих функции коммутации и усиления сигналов, до сверхсложных интегральных схем (*integrated circuits, IC*), объединяющих миллиарды взаимодействующих элементов и обеспечивающих вычислительную мощность всех современных цифровых устройств - от мобильных гаджетов до высокопроизводительных вычислительных систем.

Данное свойство регулируемой проводимости стало революционным прорывом, позволившим заменить энергозатратные электронно-вакуумные лампы компактными твердотельными устройствами с высокой скоростью работы и энергетической эффективностью. Принцип переключения между состояниями различной проводимости лег в основу двоичной логики (*binary logic*), ставшей фундаментом цифровой электроники. Каждый транзистор в микросхеме выполняет функцию управляемого электронного ключа.

Современные технологии обеспечивают прецизионный контроль:

- концентрации и типа носителей заряда;
- их пространственного распределения в полупроводниковой структуре;
- формирования областей с различным типом проводимости (*n*- и *p*-типа);
- создания потенциальных барьеров и проводящих каналов.

Эволюция полупроводниковых технологий представляет собой не только достижение в области материаловедения, но и выдающееся инженерное

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						8
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

решение, основанное на фундаментальном понимании физики взаимодействия примесных атомов с кристаллической решеткой и влиянии внешних факторов на электронные свойства материалов [1].

Физические основы проводимости полупроводников находят объяснение в рамках зонной теории твердых тел (*band theory of solids*).

Согласно данной теории, в периодической структуре кристаллической решетки происходит расщепление атомных энергетических уровней с образованием разрешенных энергетических зон, разделенных областями запрещенных энергий - так называемыми запрещенными зонами (*band gaps*) [2].

При температуре абсолютного нуля (0 К) электроны полностью занимают нижние энергетические уровни (валентную зону), в то время как верхние энергетические состояния (зона проводимости) остаются незаполненными. Возможность электрической проводимости материала определяется способностью электронов перемещаться между разрешенными энергетическими зонами.

Ширина запрещенной зоны (E_g) представляет собой фундаментальный параметр, определяющий электропроводящие свойства вещества.

В проводниках энергетическая щель либо отсутствует, либо происходит перекрытие зон, что обеспечивает свободное перемещение электронов. Для диэлектриков характерны исключительно большие значения E_g (превышающие 3-4 эВ), что делает невозможным переход электронов в зону проводимости при обычных условиях.

Полупроводники занимают промежуточное положение с характерными значениями запрещенной зоны от 0.1 до 3 эВ, что позволяет электронам при комнатной температуре или под действием внешних энергетических воздействий (таких как световое облучение или тепловая энергия) преодолевать энергетический барьер и переходить в зону проводимости, обеспечивая тем самым электрическую проводимость материала [3]. Характерные значения ширины запрещенной зоны для основных полупроводниковых материалов: кремний (Si) - наиболее распространенный в микроэлектронике материал - обладает

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						9
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

величиной $E_g \approx 1.12$ эВ при комнатной температуре (300К), тогда как для германия (Ge) этот параметр составляет приблизительно 0.67 эВ при тех же условиях [4].

В результате перехода электрона из валентной зоны в зону проводимости в кристаллической решетке образуется незаполненное электронное состояние – так называемая *дырка* (*hole*). Данная квазичастица, обладающая эффективным положительным зарядом, демонстрирует подвижность в кристалле, внося существенный вклад в общую электропроводность материала.



Рисунок 1.1 — Энергетическая диаграмма собственного полупроводника

В собственных (чистых, нелегированных) полупроводниках наблюдается равенство концентраций носителей заряда: количество электронов проводимости (n_i) в точности соответствует концентрации дырок (p_i).

Эти величины подчиняются следующему фундаментальному соотношению:

$$n_i = p_i = \sqrt{N_c N_v} \cdot \exp\left(-\frac{E_g}{2k_b T}\right), \quad (1.1)$$

где N_c и N_v — эффективные плотности состояний в зоне проводимости и валентной зоне соответственно, k_b — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура. Это уравнение демонстрирует экспоненциальную зависимость собственной проводимости от температуры и ширины запрещённой зоны.

Модификация и точная регулировка электрофизических характеристик полупроводников достигается посредством легирования (*doping*).

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						10
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

Данный технологический процесс основан на внедрении в кристаллическую структуру полупроводника специально подобранных примесных атомов, что приводит к существенному (на несколько порядков) изменению концентрации свободных носителей заряда по сравнению с собственной проводимостью материала.

В зависимости от типа вводимых примесей, легирование позволяет целенаправленно увеличивать либо концентрацию электронов, либо дырок, формируя тем самым полупроводники с преобладающей электронной (*n*-тип) или дырочной (*p*-тип) проводимостью [5].

Легирование представляет собой фундаментальный технологический процесс, лежащий в основе производства современных полупроводниковых устройств.

Благодаря точному контролю типа и концентрации примесных атомов становится возможным:

- создание областей с различными типами проводимости (*n*-тип, *p*-тип);
- формирование *p-n*-переходов - базовых структурных элементов большинства полупроводниковых приборов;
- проектирование сложных многослойных структур с заданными электрофизическими характеристиками.

Донорные примеси (*donors*) представляют собой особый класс легирующих добавок, которые при внедрении в кристаллическую решетку полупроводника увеличивают концентрацию свободных электронов, формируя материал с *n*-типом проводимости. В случае кремния - четырехвалентного элемента IV группы периодической системы - в качестве доноров наиболее часто используют элементы V группы, такие как фосфор (P), мышьяк (As) и сурьма (Sb).

Физический механизм донорного действия заключается в том, что атом примеси, замещая атом кремния в узле кристаллической решетки, вносит пять валентных электронов вместо четырех. Четыре из этих электронов образуют

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						11
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

полноценные ковалентные связи с соседними атомами кремния, тогда как пятый электрон оказывается слабосвязанным с атомным ядром.

Благодаря незначительной энергии связи (например, около 0.054 эВ для мышьяка в кремнии), этот избыточный электрон может быть легко переведен в зону проводимости даже при комнатной температуре. Важно отметить, что энергетические уровни донорных примесей располагаются в запрещенной зоне в непосредственной близости от нижней границы зоны проводимости, что и обеспечивает их высокую эффективность в качестве источников свободных носителей заряда [6].

Акцепторные примеси (*acceptors*) представляют собой важный класс легирующих элементов, способствующих образованию дырочной проводимости в полупроводниках. При внедрении таких примесных атомов в кристаллическую решетку материал приобретает *p*-тип проводимости.

В случае кремния в качестве акцепторов преимущественно используются трехвалентные элементы III группы периодической системы, включая бор (B), алюминий (Al) и галлий (Ga).

Механизм акцепторного действия основан на особенностях электронной структуры примесных атомов. Замещая атом кремния в кристаллической решетке, акцептор, имеющий лишь три валентных электрона, не может полностью сформировать четыре ковалентные связи с соседними атомами. Для компенсации этого дефицита акцептор захватывает электрон из валентной зоны кристалла, что приводит к образованию свободной дырки в валентной зоне.

Энергетическая диаграмма акцепторных центров характеризуется расположением их уровней в запрещенной зоне вблизи верхней границы валентной зоны. Такое расположение существенно облегчает переход валентных электронов на акцепторные уровни, поскольку для этого процесса требуется сравнительно небольшая энергия возбуждения.

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						12
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

В результате, даже при комнатной температуре в полупроводнике, образуется значительное количество подвижных дырок, обеспечивающих выраженную дырочную проводимость материала [7].

Концентрация свободных носителей заряда (n для электронов и p для дырок) в легированном полупроводнике определяется концентрацией ионизированных доноров (ND^+) и акцепторов (NA^-).

В состоянии термодинамического равновесия концентрации носителей подчиняются закону действия масс:

$$n \cdot p = n_i^2, \quad (1.2)$$

где n_i — собственная концентрация носителей заряда.

Условие электронейтральности в объёме полупроводника выражается как:

$$N_D^+ + p = N_A^- = n \quad (1.3)$$

Представленные уравнения дают возможность определить равновесные концентрации носителей заряда для заданных уровней легирования. Однако на практике картина часто осложняется эффектом компенсации (*compensation*), возникающим при одновременном присутствии в материале донорных и акцепторных примесей, которые частично нейтрализуют влияние друг друга.

Особый интерес представляет явление самокомпенсации (*self-compensation*), наблюдаемое в случаях, когда примесные атомы могут занимать различные позиции в кристаллической решетке. В зависимости от конкретного кристаллографического положения (замещающие узлы или междоузлия) и зарядового состояния, такие примеси способны проявлять либо донорные, либо акцепторные характеристики, что существенно усложняет процесс управления электронными свойствами полупроводникового материала [8].

Критически важным аспектом легирования является электрическая активность примеси (*electrical activity of impurity*). Не все введенные в полупроводник атомы примеси обязательно становятся электрически активными, то есть вносят вклад в концентрацию свободных носителей заряда.

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						13
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

Атомы примеси могут находиться в различных состояниях в кристаллической решётке, каждое из которых по-разному влияет на электрические свойства:

1. Замещающие атомы (*substitutional atoms*): примесь располагается в узлах кристаллической решётки, замещая атомы матрицы. Именно такие атомы, как правило, являются электрически активными, поскольку они формируют неполные или избыточные связи, приводящие к появлению свободных носителей. Например, атом As, замещающий атом Si, является донором.

2. Межузельные атомы (*interstitial atoms*): примесь располагается в межузельях кристаллической решётки, не занимая узлов. Межузельные атомы обычно электрически неактивны, но обладают высокой подвижностью, что играет значительную роль в процессах диффузии примесей [9].

3. Образование комплексов (*complex formation*): атомы примеси могут образовывать стабильные комплексы с собственными дефектами кристалла (вакансиями (*vacancies*), межузельными атомами (*interstitials*)) или с другими атомами примеси.

Такие комплексы часто являются электрически неактивными и могут выступать в качестве центров рекомбинации или рассеяния носителей заряда, ухудшая электрические свойства материала и сокращая время жизни носителей [10]. Например, в кремнии при высоких концентрациях As наблюдается образование электрически неактивных кластеров мышьяка с вакансиями ($As_n V_m$), что приводит к деактивации части легирующей примеси [11, 12].

4. Преципитация (*precipitation*): при достижении концентрацией примеси предела растворимости в твёрдой фазе, примесь начинает выделяться в виде второй фазы или нанокластеров. Этот процесс приводит к резкому снижению электрически активной концентрации, поскольку атомы примеси формируют непроводящие или слабопроводящие выделения. Преципитация является значительной проблемой при создании высоколегированных областей в полупроводниках [13].

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						14
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

Контроль электрической активности примесей представляет собой критически важный аспект при производстве полупроводниковых приборов. Для достижения оптимальных характеристик устройств требуется тщательный подбор параметров легирования и последующей термической обработки. Отклонение от оптимальных технологических режимов может привести к недостаточной активации легирующих примесей, образованию структурных дефектов кристаллической решетки, а также формированию нежелательных примесных кластеров и комплексов. Все эти факторы негативно влияют на ключевые эксплуатационные характеристики приборов, снижая их производительность и надежность.

Характерным примером подобных эффектов служит поведение мышьяка в высоколегированном кремнии. В таких системах наблюдается заметное снижение подвижности электронов, обусловленное несколькими факторами: усиленным рассеянием носителей заряда на кластерах мышьяка, а также значительным влиянием эффектов электростатического экранирования.

Эти явления особенно важны при проектировании сильно легированных областей современных полупроводниковых приборов, где даже незначительные изменения концентрации и распределения примесей могут существенно влиять на конечные характеристики устройства [14].

Процессы легирования в производстве полупроводников включают несколько основных методов, каждый из которых имеет свои преимущества, ограничения и специфические физические механизмы:

1. Диффузия (*diffusion*): служит классическим способом внедрения примесей в полупроводники, где перемещение атомов происходит благодаря тепловой активации. В этом процессе примесные атомы мигрируют из зон повышенной концентрации (газообразной среды или поверхностных слоев) в объем материала с более низким содержанием данных элементов. Кинетику распределения примесей количественно описывают уравнения Фика, где первое уравнение характеризует установившийся поток частиц.

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		15

Физические основы процесса:

- механизм переноса реализуется через случайные скачки атомов в кристаллической решетке;
- транспорт примесей часто происходит с участием точечных дефектов структуры;
- коэффициент диффузии экспоненциально зависит от температуры;
- глубина проникновения определяется временем и температурой обработки.

Технологические особенности:

- температурный диапазон 800-1200°C для кремния;
- возможность создания плавных профилей легирования;
- ограничения по точности позиционирования p-n-переходов;
- применение в производстве силовых приборов и биполярных транзисторов.

Первый закон Фика устанавливает линейную зависимость между плотностью потока примеси и градиентом ее концентрации:

$$J = -D \frac{\partial C}{\partial x}, \quad (1.4)$$

где J – поток, D – коэффициент диффузии, C – концентрация, x – координата.

Второй закон Фика описывает нестационарную диффузию:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (1.5)$$

Коэффициент диффузии D сильно зависит от температуры по закону Аррениуса:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right), \quad (1.6)$$

где D_0 – предэкспоненциальный множитель, E_a – энергия активации [15].

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						16
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

Диффузионный метод легирования обеспечивает формирование достаточно глубоких *p-n*-переходов (обычно в диапазоне 1-10 мкм) и позволяет создавать легированные области с заданной глубиной проникновения примесей.

Однако данный подход имеет существенное ограничение - относительно низкую точность контроля профиля распределения примесей по сравнению с современными методами, такими как ионная имплантация.

2. Ионная имплантация (*ion implantation*): это высокоточный метод легирования, основанный на внедрении ускоренных ионов примеси в поверхностный слой полупроводника. Ключевые особенности метода включают:

- точный контроль параметров: регулировка дозы (10^{11} – 10^{16} ионов/см²) и глубины залегания (10–1000 нм);
- селективность: возможность локального легирования через фотолитографические маски;
- гибкость: независимость от термодинамических ограничений растворимости.

После имплантации необходим отжиг (600–1100°C) для активации примесей и восстановления кристаллической структуры. Метод критически важен для производства современных наноразмерных приборов, обеспечивая воспроизводимость (<1% отклонений) и возможность создания сверхрезких переходов [16].

Профиль распределения имплантированных ионов в полупроводниковой подложке обычно аппроксимируется гауссовским распределением или более сложными функциями (например, распределением Пирсона). Однако процесс внедрения высокоэнергетических ионов сопровождается значительным повреждением кристаллической структуры, приводя к образованию:

- точечных дефектов (вакансии и межузельные атомы);
- областей с нарушенной кристаллической структурой;
- локальных аморфных зон;

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						17
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

Для восстановления кристаллической решетки и активации электрической активности примесей проводится термический отжиг. Этот процесс выполняется при температурах 600-1100°C (для кремния) и позволяет:

- восстановить кристаллическую структуру;
- активировать имплантированные примеси;
- уменьшить концентрацию дефектов.

Оптимизация параметров отжига (температура, время, среда) критически важна для достижения требуемых электрофизических характеристик легированного слоя [17].

После ионной имплантации для восстановления кристаллической структуры и активации примесей применяют различные методы термической обработки.

Традиционный печной отжиг выполняется при температурах 600-1000°C в течение десятков минут или часов, обеспечивая равномерный прогрев всей подложки, но приводя к заметной диффузии примесных атомов.

Альтернативой служит быстрый термический отжиг (*RTA*), при котором нагрев до 1200°C осуществляется в течение всего нескольких секунд с помощью ламп накаливания, инфракрасных излучателей или лазерного воздействия.

Основное преимущество *RTA* заключается в минимальном перемещении примесных атомов, что позволяет сохранять заданные резкие профили легирования, особенно важные для современных наноразмерных технологий. Этот метод также обеспечивает лучший контроль температурных профилей по сравнению с традиционным печным отжигом.

Оба подхода могут проводиться в различных газовых средах, таких как азот, аргон или формирующий газ, что способствует улучшению качества поверхности и электрических характеристик восстанавливаемого слоя. Выбор конкретного метода отжига определяется требованиями к конечным параметрам полупроводниковой структуры и технологическими ограничениями производства [18].

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						18
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

3. Эпитаксиальный рост (*epitaxial growth*): этот метод заключается в выращивании тонких монокристаллических слоёв полупроводникового материала на подложке с сохранением её кристаллической ориентации. Легирование может быть осуществлено *in situ* (непосредственно в процессе роста) путём добавления примесей в газовую фазу (например, при эпитаксии из газовой фазы, *chemical vapor deposition, CVD*) или расплав (при жидкофазной эпитаксии, *liquid phase epitaxy, LPE*) во время роста слоя [19].

Эпитаксиальный рост позволяет получать высококачественные слои с очень контролируемым профилем легирования, резкими границами *p-n*-переходов и низким уровнем дефектов, что критически важно для производства высокопроизводительных устройств, таких как транзисторы на гетероструктурах и оптоэлектронные компоненты. Разновидностью является молекулярно-лучевая эпитаксия (*molecular beam epitaxy, MBE*), которая позволяет выращивать слои с атомной точностью и формировать сверхтонкие структуры [20].

1.2 Теоретические и экспериментальные исследования системы «кремний – мышьяк»

Система «кремний – мышьяк» (Si–As) является одной из наиболее изученных и технологически значимых в полупроводниковой промышленности, поскольку мышьяк широко используется в качестве донорной примеси для создания *n*-областей в кремниевых приборах.

Понимание поведения As в Si, включая его растворимость, диффузию, электрическую активацию и формирование кластеров, имеет решающее значение для оптимизации производственных процессов и обеспечения надёжности устройств. Исследования в этой области охватывают как экспериментальные, так и теоретические подходы.

1.2.1 Поведение мышьяка в кремнии: растворимость, активация и деактивация. Мышьяк в кремнии преимущественно занимает замещающие положения (As_s), где он действует как донор, отдавая один электрон в зону проводимости [21]. Однако при высоких концентрациях, превышающих определённый порог

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						19
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

(обычно 10^{20} см^{-3}), наблюдается явление деактивации (*deactivation*), при котором значительная часть введённых атомов As перестаёт быть электрически активной [12, 22]. Это явление связано с формированием электрически неактивных комплексов и кластеров, а также с преципитацией мышьяка.

Механизмы деактивации мышьяка в кремнии являются предметом интенсивных исследований на протяжении десятилетий, поскольку они напрямую влияют на достижимую концентрацию свободных носителей заряда и, следовательно, на производительность устройств.

Одним из ключевых факторов, приводящих к деактивации, является образование электрически неактивных кластеров мышьяка (*electrically inactive arsenic clusters*). Эти кластеры представляют собой агрегаты атомов As, часто включающие также собственные дефекты кремния, такие как вакансии (V).

Наиболее распространённой и подтверждённой моделью является формирование кластеров типа As_nV_m , где n — количество атомов As, а m — количество вакансий [11, 23]. Например, кластеры As_2V , As_3V , As_4V и As_4V_2 были предложены и изучены как с теоретической, так и с экспериментальной точки зрения [11, 23, 36]. Эти кластеры эффективно связывают атомы мышьяка, выводя их из электрически активного состояния и уменьшая концентрацию свободных электронов.

Экспериментальные исследования убедительно продемонстрировали существование и влияние этих кластеров. Например, работы с использованием метода вторичной ионной масс-спектрометрии (*SIMS*) для измерения общей концентрации As и измерений эффекта Холла для определения электрически активной концентрации показали, что при отжиге имплантированного As при температурах выше 600°C активная концентрация достигает плато, которое значительно ниже общей концентрации As [12].

Это является прямым свидетельством деактивации As за счёт образования кластеров. Дальнейшие исследования с использованием просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения (*HRTEM*) и энергетической

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						20
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

дисперсионной рентгеновской спектроскопии (*EDX*) позволили непосредственно визуализировать и идентифицировать эти кластеры, подтверждая их наноразмерную природу и состав [26].

Другим важным аспектом деактивации является преципитация мышьяка (*arsenic precipitation*). Это явление происходит, когда общая концентрация As превышает его равновесную растворимость (*equilibrium solubility*) в кремнии при данной температуре.

Преципитация и кластеризация уменьшают коэффициент диффузии при термообработке, так как только часть примеси находится в узлах решетки, она и является мобильной. Наиболее склонны к образованию прицепитатов и кластеров бор и мышьяк. Причем, появление кластеров наблюдается в кремнии независимо от способа легирования – имплантацией или диффузией. В случае легирования кремния фосфором кластеризации не наблюдается.

Растворимость As в Si является критическим параметром, определяющим максимальную концентрацию, которая может быть растворена в кристаллической решётке Si в термодинамическом равновесии. Экспериментальные данные показывают, что растворимость As в Si значительно увеличивается с ростом температуры.

Однако, даже при высоких температурах, используемых в процессах отжига (например, 1000°C), равновесная растворимость As в Si может быть ниже концентраций, достигаемых при высокодозной ионной имплантации.

В таких условиях избыточный As начинает выделяться из твёрдого раствора, формируя преципитаты (*precipitates*), которые представляют собой микроскопические или наноскопические включения новой фазы, часто состоящей из соединений Si и As (например, SiAs или Si_xAs_y) или чистых кластеров As [13, 37].

Эти преципитаты являются электрически неактивными и могут служить центрами рассеяния носителей заряда, ухудшая подвижность и снижая эффективность приборов.

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						21
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

Влияние деактивации и преципитации на характеристики полупроводниковых устройств многогранно.

Во-первых, они напрямую ограничивают максимальную достижимую концентрацию свободных носителей заряда, что снижает проводимость и может препятствовать формированию низкоомных контактов.

Во-вторых, кластеры и преципитаты могут выступать в качестве центров рекомбинации или ловушек для носителей заряда, что приводит к сокращению времени жизни носителей и ухудшению характеристик биполярных транзисторов и оптоэлектронных устройств.

В-третьих, эти дефекты могут вызывать механические напряжения в кристаллической решётке, что приводит к образованию дислокаций и других структурных дефектов, которые также негативно влияют на электрические свойства [13]. Понимание кинетики формирования и диссоциации кластеров и преципитатов критически важно для оптимизации режимов термической обработки, таких как быстрый термический отжиг (*RTA*), который позволяет активировать примесь при минимальной диффузии, но при этом необходимо учитывать условия, предотвращающие чрезмерное кластерообразование или преципитацию.

1.2.2 Методы исследования. Для изучения поведения As в Si используются различные экспериментальные методы:

1. Вторичная ионная масс-спектрометрия (*Secondary Ion Mass Spectrometry, SIMS*): Этот метод позволяет получить профиль распределения общей концентрации примеси по глубине с высокой чувствительностью и пространственным разрешением [25]. SIMS широко используется для измерения дозы имплантированного As и его диффузионного профиля после отжига.

2. Измерения эффекта Холла и сопротивления (*Hall effect and resistivity measurements*): Эти методы используются для определения концентрации свободных носителей заряда (электронов) и их подвижности, что позволяет оценить электрически активную концентрацию As [14]. Сравнение данных SIMS и Холла позволяет выявить долю деактивированного As.

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		22

3. Просвечивающая электронная микроскопия (*Transmission Electron Microscopy, TEM*): TEM позволяет визуализировать микроструктуру материала, включая образование кластеров As, преципитатов и дислокаций. Методы высокого разрешения (*High-Resolution TEM, HRTEM*) и энергетической дисперсионной рентгеновской спектроскопии (*Energy Dispersive X-ray Spectroscopy, EDX*) в сочетании с TEM позволяют идентифицировать состав и структуру кластеров [26].

4. Рентгеновская дифракция (*X-ray Diffraction, XRD*): XRD может быть использована для определения деформаций решётки, вызванных внедрением As, а также для идентификации фаз преципитатов.

5. Методы ядерной физики (*Nuclear techniques*): Такие методы, как резерфордское обратное рассеяние (*Rutherford Backscattering Spectrometry, RBS*) и ядерные реакции, могут быть использованы для определения глубинных профилей As и его кристаллографического положения (замещающее или межузельное) [27].

1.2.3 Теоретическое моделирование поведения мышьяка в кремнии. Теоретические исследования играют ключевую роль в объяснении экспериментальных наблюдений и предсказании поведения As в Si. Они включают в себя различные подходы:

- модели на основе теории функционала плотности (*Density Functional Theory, DFT*): *Ab initio* расчёты на основе *DFT* позволяют исследовать энергетику образования различных дефектов (вакансий, межузельных атомов) и комплексов (например, As–V, As–I), их стабильность, зарядовые состояния и миграционные барьеры [10, 28]. Эти расчёты предоставляют фундаментальные параметры для более высокоуровневых моделей. Например, *Jones et al.* [10] использовали *ab initio* методы для изучения энергетических уровней и стабильности различных дефектов в Si, включая те, что связаны с As;

- квазихимические модели (*Quasi-chemical models*): эти модели описывают взаимодействие примесей и дефектов с помощью системы

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						23
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

квазихимических реакций, каждая из которых имеет свою константу равновесия, зависящую от температуры и энтальпии реакции [29, 30]. Такие модели позволяют рассчитывать равновесные концентрации различных форм As (активный As, кластеры, преципитаты) как функцию общей концентрации As, температуры и концентрации собственных дефектов. Примером является модель, предложенная Cowern *et al.* [11], которая успешно объясняет деактивацию As через формирование кластеров As_nV_m ;

- кинетические модели (*Kinetic models*): эти модели учитывают временную эволюцию концентраций различных форм As и дефектов, позволяя моделировать процессы диффузии, активации и деактивации в условиях неравновесия, например, во время быстрого термического отжига [31]. Кинетические модели часто используют параметры, полученные из *ab initio* расчётов и экспериментальных данных. Они позволяют прогнозировать профили легирования и электрическую активность после различных этапов обработки;

- термодинамические модели фазовых равновесий: эти модели, основанные на минимизации свободной энергии системы, позволяют построить диаграммы состояния бинарных систем, таких как Si-As, и определить пределы растворимости As в Si при различных температурах [24, 32]. Они являются основой для понимания условий преципитации.

1.2.4 Влияние условий обработки на поведение мышьяка. Поведение As в Si сильно зависит от условий технологической обработки, особенно от режимов ионной имплантации и последующего отжига:

- доза имплантации (*Implantation dose*): при низких дозах As (ниже 10^{19} см^{-3}) практически весь имплантированный As может быть электрически активирован после отжига. Однако при высоких дозах (выше 10^{20} см^{-3}) формируются большие количества радиационных дефектов, и деактивация As становится доминирующим явлением из-за образования кластеров и преципитатов [12, 33];

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						24
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

– температура и время отжига (*Annealing temperature and time*): отжиг при высоких температурах (например, 900–1050°C) в течение короткого времени (*RTA*) способствует активации As и устранению радиационных дефектов, но также может привести к формированию кластеров и преципитатов, если концентрация As превышает равновесную растворимость при данной температуре. Более длительный отжиг при высоких температурах может способствовать росту кластеров и дальнейшей деактивации [34];

– влияние сопутствующих дефектов (*Influence of co-defects*): присутствие собственных дефектов Si (вакансий и межузельных атомов) играет ключевую роль в диффузии и активации As. As в Si диффундирует преимущественно по вакансионному механизму, образуя комплексы As–V [9]. Избыток вакансий может способствовать активации As, в то время как избыток межузельных атомов может приводить к деактивации и ускоренной диффузии As. Контроль над концентрацией собственных дефектов, например, путём со-имплантации или использования специальных режимов отжига, является важным аспектом оптимизации легирования As [35].

1.3 Методы расчёта фазовых равновесий и спинодального распада

Расчёт фазовых равновесий и анализ спинодального распада являются фундаментальными задачами в материаловедении, особенно применительно к полупроводниковым системам, где даже небольшие изменения в составе и микроструктуре могут кардинально влиять на электрические и оптические свойства.

Понимание этих процессов позволяет прогнозировать стабильность твёрдых растворов, условия образования новых фаз и механизмы микроструктурных превращений, что критически важно для оптимизации технологических процессов и создания материалов с заданными характеристиками.

1.3.1 Термодинамические основы фазовых равновесий. Основой для расчёта фазовых равновесий служит принцип минимизации термодинамического потенциала системы при заданных внешних условиях. Для систем с постоянной

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						25
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

температурой (T) и давлением (P) таким потенциалом является свободная энергия Гиббса (G) [38]:

$$G = H - TS, \quad (1.7)$$

где H — энтальпия системы, S — энтропия, T — абсолютная температура.

В равновесии свободная энергия Гиббса системы достигает своего минимума.

Для многокомпонентных систем свободная энергия Гиббса зависит от температуры, давления и состава фаз.

Для бинарной системы, состоящей из компонентов A и B , свободная энергия Гиббса моля раствора может быть выражена как функция концентрации одного из компонентов (например, x_B — мольная доля компонента B):

$$G(x_B, T, P) = x_B G_A^0 + x_B G_B^0 + RT(x_A \ln x_A + x_B \ln x_B) + G^{ex}, \quad (1.8)$$

где G_A^0 и G_B^0 — мольные свободные энергии чистых компонентов A и B в данной фазе, R — универсальная газовая постоянная, а G^{ex} — избыточная свободная энергия Гиббса, которая учитывает отклонения от идеального поведения раствора.

Избыточная энергия G^{ex} отражает взаимодействия между атомами A и B , которые отличаются от взаимодействий $A-A$ и $B-B$. Для идеального раствора (*ideal solution*) $G^{ex}=0$. Для регулярного раствора (*regular solution*), G^{ex} часто аппроксимируется выражением:

$$G^{ex} = \Omega x_A x_B, \quad (1.9)$$

где Ω — параметр взаимодействия, который может быть функцией температуры.

Положительное значение Ω указывает на тенденцию к расслоению, а отрицательное — на тенденцию к образованию упорядоченных фаз или стабильных растворов.

Более сложные модели, такие как субрегулярные растворы (*subregular solutions*), используют полиномиальные зависимости для « Ω » от концентрации,

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						26
Изм.	Лист	№ докум	Подп.	Дата		

что позволяет более точно описывать асимметричное поведение реальных систем [39].

Условием фазового равновесия между двумя фазами (α и β) является равенство химических потенциалов каждого компонента в обеих фазах:

$$\mu_A^\alpha = \mu_A^\beta \quad (1.10)$$

$$\mu_B^\alpha = \mu_B^\beta, \quad (1.11)$$

где химический потенциал μ_i определяется как частная производная свободной энергии Гиббса по количеству i -го компонента при постоянных T , P и количествах других компонентов:

$$\mu_i = \left(\frac{\partial C}{\partial N_i} \right)_{T, P, N_j \neq i} \quad (1.12)$$

Графически это соответствует общей касательной к кривым свободной энергии Гиббса для двух фаз при данной температуре. Точки касания определяют равновесные концентрации компонентов в сосуществующих фазах.

На основе этих принципов строятся фазовые диаграммы (*phase diagrams*), которые графически отображают области стабильности различных фаз и их равновесные соотношения в зависимости от температуры, давления и состава. Для бинарных систем наиболее распространены диаграммы «температура – концентрация» ($T-x$), на которых выделяются кривые ликвидуса (*liquidus*) и солидуса (*solidus*).

Кривая ликвидуса показывает температуру, при которой начинается кристаллизация из расплава при заданном составе, а кривая солидуса – температуру, при которой завершается кристаллизация твёрдого раствора. Пространство между этими кривыми соответствует области сосуществования жидкой и твёрдой фаз [32].

1.3.2. Спинодальный распад. Помимо равновесия между различными фазами, в твёрдых растворах может происходить явление спинодального распада (*spinodal decomposition*). Это механизм фазового разделения, который

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						27
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

отличается от зародышеобразования и роста тем, что он не требует преодоления энергетического барьера для формирования новой фазы.

Спинодальный распад происходит путём непрерывного изменения концентрации в объёме материала, приводя к образованию периодических флуктуаций состава, которые со временем усиливаются [40].

Термодинамическим критерием для спинодального распада является отрицательная вторая производная свободной энергии Гиббса по концентрации:

$$\left(\frac{\partial^2 G}{\partial x^2}\right)_{T,P} < 0 \quad (1.13)$$

Область, где выполняется это условие, называется спинодальной областью (*spinodal region*). Она находится внутри бинодали (*binodal*), или кривой растворимости, которая определяет равновесные концентрации сосуществующих фаз.

Граница спинодальной области называется кривой спинодали (*spinodal curve*) и соответствует точкам перегиба на кривой свободной энергии Гиббса, где $\left(\frac{\partial^2 G}{\partial x^2}\right)_{T,P} = 0$.

Спинодальный распад часто приводит к образованию наноструктур с периодическим изменением состава, что может быть как желаемым эффектом (например, для создания квантовых точек или сверхрешёток), так и нежелательным (например, для стабильности легированных полупроводников).

В системе Si-As, при высоких концентрациях As, возможно попадание в спинодальную область, что может способствовать образованию кластеров As или фаз SiAs без необходимости преодоления значительных энергетических барьеров, что влияет на электрическую активность и подвижность носителей заряда [41].

1.3.3. Методы расчёта фазовых равновесий и спинодального распада. Для расчёта фазовых равновесий и спинодали используются различные вычислительные подходы:

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						28
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

1. Метод *CALPHAD* (*CAL*culat*ion of PH*ase *Diagrams*): это мощный и широко используемый подход для термодинамического моделирования многокомпонентных систем и построения фазовых диаграмм [42, 43]. Метод основан на феноменологическом описании свободной энергии Гиббса каждой фазы с использованием математических моделей (например, модели регулярного или субрегулярного раствора).

Параметры этих моделей (параметры взаимодействия, энергии образования чистых компонентов) определяются путём оптимизации по экспериментальным данным (температуры плавления, энтальпии образования, активности компонентов, фазовые границы).

После определения всех параметров свободная энергия Гиббса для каждой фазы может быть рассчитана как функция температуры, давления и состава, что позволяет затем вычислить равновесные фазовые границы и спинодали. Существуют коммерческие программные пакеты (например, *Thermo-Calc*, *FactSage*), реализующие метод *CALPHAD*, которые содержат обширные базы данных термодинамических параметров для различных систем.

2. *Ab initio* расчёты на основе *DFT*: теория функционала плотности (*Density Functional Theory, DFT*) позволяет рассчитывать энергии образования, стабильность и электронную структуру различных фаз и дефектов с высокой точностью, исходя из первых принципов, без использования эмпирических параметров [44].

Эти расчёты могут быть использованы для определения свободных энергий чистых компонентов и параметров взаимодействия, которые затем могут быть интегрированы в модели *CALPHAD* или использованы для прямого построения фазовых диаграмм. Например, использовали *DFT* для изучения диффузии As в Si, что также даёт информацию о стабильности различных конфигураций [28]. Хотя *ab initio* расчёты очень точны, они обычно применяются для небольших систем или для получения фундаментальных параметров.

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						29
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

3. Метод Монте-Карло (MC) и кинетический Монте-Карло (KMC) (*Monte Carlo and Kinetic Monte Carlo*): эти методы являются мощными инструментами для моделирования микроструктурной эволюции и фазовых превращений, включая спинодальный распад, на атомном уровне [45].

В данном методе система эволюционирует к равновесному состоянию путём случайных перемещений атомов, которые принимаются или отвергаются в соответствии с критерием Метрополиса, минимизирующим энергию системы. KMC расширяет этот подход, учитывая кинетику процессов, таких как диффузия и реакции образования/диссоциации кластеров, с использованием частот элементарных актов [31, 46].

4. Моделирование методом фазового поля (*Phase-field modeling*): этот подход является континуальным методом, который описывает эволюцию микроструктуры путём решения уравнений для полей порядка, которые характеризуют фазовое состояние и состав в каждой точке пространства [47].

Метод позволяет моделировать сложные морфологии, возникающие при спинодальном распаде, такие как ламеллярные или спинодальные структуры, а также их эволюцию во времени. Он особенно полезен для изучения крупномасштабных явлений и взаимодействия между фазовым разделением и механическими напряжениями.

1.3.4 Применение к системе «кремний – мышьяк». Применительно к системе «кремний – мышьяк», расчёт фазовых равновесий и спинодали имеет прямое практическое значение. Высоколегированный кремний с мышьяком, используемый в современных транзисторах (например, в истоках/стоках *FinFET*), часто содержит концентрации As, которые значительно превышают равновесную растворимость при рабочих температурах или даже при температурах отжига. Это создаёт условия для деактивации As путём образования кластеров и преципитатов.

Расчёт кривой растворимости (бинодали) для As в Si позволяет определить максимальную электрически активную концентрацию, которую можно

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						30
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

ожидать при данной температуре. Например, данные *Trumbore* [24] и более поздние исследования показывают, что растворимость As в Si достигает максимума около $2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ при 1000°C , но резко падает при более низких температурах.

Анализ кривой спинодали для системы Si-As позволяет предсказать условия, при которых твёрдый раствор As в Si становится термодинамически неустойчивым к непрерывным флуктуациям состава. Если технологический процесс (например, быстрый отжиг после имплантации) приводит к состоянию, попадающему в спинодальную область, то это может способствовать быстрому формированию наноразмерных кластеров As, что приводит к деактивации без необходимости преодоления барьера зародышеобразования [11, 23]. Понимание этой кинетики имеет решающее значение для предотвращения нежелательной деактивации и оптимизации электрических свойств.

Использование комбинации *ab initio* расчётов для определения фундаментальных параметров взаимодействия, квазихимических моделей для описания равновесных концентраций кластеров и кинетических моделей или методов Монте-Карло для моделирования динамики кластерообразования и преципитации позволяет создать комплексную картину поведения As в Si.

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						31
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

2 Расчёт равновесия «твёрдая фаза – жидкая фаза» в системе «кремний – мышьяк»

В данном разделе представлен расчёт фазового равновесия между твёрдой и жидкой фазами в бинарной полупроводниковой системе «кремний – мышьяк» (Si-As).

Целью расчёта является построение кривых ликвидуса и солидуса, которые определяют температуры начала и конца кристаллизации для различных составов, а также равновесные концентрации компонентов в сосуществующих фазах. Эти данные критически важны для понимания процессов роста кристаллов и легирования из расплава.

Для описания термодинамических свойств твёрдой и жидкой фаз системы Si-As используется модель регулярного раствора. Эта модель позволяет учесть отклонения от идеального поведения, возникающие из-за взаимодействий между атомами кремния и мышьяка. Свободная энергия Гиббса для каждой фазы (G^L для жидкой и G^S для твёрдой) может быть выражена как:

$$G^k = x_{As} G_{As}^{0,k} + x_{Si} G_{Si}^{0,k} + RT(x_{As} \ln x_{As} + x_{Si} \ln x_{Si}) + \Omega^k x_{As} x_{Si}, \quad (2.1)$$

где k обозначает фазу (L – жидкая, S – твёрдая), x_{As} и x_{Si} – мольные доли мышьяка и кремния соответственно, $G_i^{0,k}$ – мольная свободная энергия чистого компонента i в фазе k , R – универсальная газовая постоянная, T – абсолютная температура, а Ω^k – параметр взаимодействия для фазы k .

Параметры, используемые в расчёте:

- универсальная газовая постоянная: $R = 8.31$ Дж/(моль·К);
- энтальпия плавления кремния: $\Delta H_{Si} = 50551$ Дж/моль;
- энтальпия плавления мышьяка: $\Delta H_{As} = 27720$ Дж/моль;
- температура плавления кремния: $T_{Si} = 1685$ К;
- температура плавления мышьяка: $T_{As} = 1090$ К;

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ			
Изм.	Лист	№ докум	Подп.	Дата	Расчёт равновесия «твёрдая фаза – жидкая фаза» в системе «кремний – мышьяк»	Лит.	Лист	Листов
Разраб.		Хонин М.И.						
Пров.		Пронин И.А.		9.06.25			32	69
Н.контр		Рыжова Т.Н.		11.06.25		Гр. 21ПД1		
Утв.								

- параметр взаимодействия для твёрдой фазы: $\Omega^s = w_s = 63160$ Дж/моль;
- параметр взаимодействия для жидкой фазы, зависящий от температуры: $\Omega^L(T) = w_l(T) = (-17.33 + 5.1 \cdot 10^{(-3)} \cdot T) \cdot 10^3$ Дж/моль.

Энтропии плавления компонентов рассчитываются как $\Delta S_i = \Delta H_i / T_i$:

- энтропия плавления кремния: $\Delta S_{Si} = 30.001$ Дж/(моль·К);
- энтропия плавления мышьяка: $\Delta S_{As} = 22.427$ Дж/(моль·К).

Условием термодинамического равновесия между жидкой (L) и твёрдой (S) фазами является равенство химических потенциалов каждого компонента в обеих фазах:

$$\mu_{Si}^L = \mu_{Si}^S \quad (2.2)$$

$$\mu_{As}^L = \mu_{As}^S \quad (2.3)$$

Эти условия приводят к системе двух нелинейных уравнений относительно температуры T и равновесных концентраций мышьяка в жидкой (x_l) и твёрдой (x_s) фазах:

$$T = \frac{\Delta H_{As} \Omega^L(T) (1 - x_l)^2 - \Omega^S (1 - x_s)^2}{\Delta S_{As} + R \cdot \ln \left(\frac{x_s}{x_l} \right)} \quad (2.4)$$

$$T = \frac{\Delta H_{Si} \Omega^L(T) x_l^2 - \Omega^S x_l^2}{\Delta S_{Si} + R \cdot \ln \left(\frac{1 - x_s}{1 - x_l} \right)} \quad (2.5)$$

Решение данной системы уравнений для различных температур позволяет построить кривые ликвидуса (зависимость $x_l(T)$) и солидуса (зависимость $x_s(T)$).

Расчёт проводился численными методами, используя программное обеспечение *Mathcad*, что позволяет итерационно находить пары равновесных концентраций x_l и x_s для каждой температуры.

Результаты расчёта представлены на фазовой диаграмме «температура – концентрация» (рисунок 2.1).

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						33
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

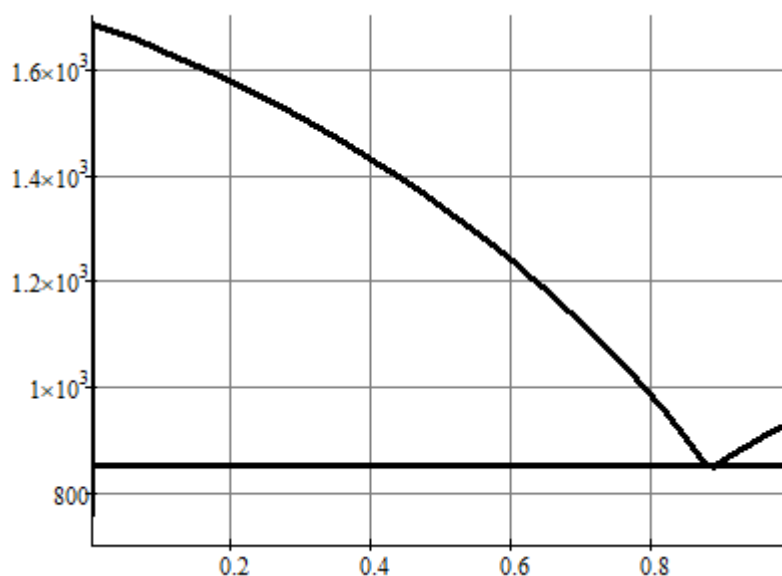


Рисунок 2.1 — Рассчитанная фазовая диаграмма системы «кремний – мышьяк»

На полученной диаграмме видно, что кривая ликвидуса описывает температуру, при которой начинается кристаллизация из расплава, а кривая солидуса показывает состав твёрдого раствора, находящегося в равновесии с жидкой фазой при данной температуре.

Характерной особенностью системы Si–As является очень низкая растворимость мышьяка в твёрдом кремнии, что проявляется в том, что кривая солидуса проходит очень близко к оси чистого кремния. Это означает, что даже при относительно небольших концентрациях мышьяка в расплаве, в твёрдую фазу переходит лишь крайне малая его часть. На диаграмме также прослеживается эвтектическая точка, указывающая на минимальную температуру плавления смеси.

Высокое значение параметра взаимодействия Ω^S для твёрдой фазы (63160 Дж/моль) подтверждает сильное отталкивание между атомами Si и As в кристаллической решётке, что и обуславливает низкую растворимость As в твёрдом кремнии. Напротив, параметр $\Omega^L(T)$ для жидкой фазы, имеющий отрицательные значения при высоких температурах, указывает на тенденцию к смешиванию компонентов в расплаве.

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						34
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

Полученная фазовая диаграмма согласуется с общими представлениями о поведении примесей V группы в кремнии и подтверждает, что при кристаллизации из расплава мышьяк преимущественно остаётся в жидкой фазе, что затрудняет получение высоколегированного кремния методом направленной кристаллизации. Эти результаты являются основой для дальнейшего анализа стабильности твёрдых растворов и спинодального распада

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						35
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

3 Расчёт и анализ кривой спинодали в системе «кремний – мышьяк»

В данном разделе представлен расчёт и анализ кривой спинодали для твёрдого раствора мышьяка в кремнии.

Понимание спинодального распада критически важно для высоколегированных полупроводников, поскольку этот механизм фазового разделения может приводить к образованию наноразмерных кластеров и преципитатов, которые деактивируют электрически активную примесь и ухудшают характеристики приборов.

Как было отмечено в пункте 1.3.2, термодинамическим критерием для спинодального распада является отрицательная вторая производная свободной энергии Гиббса по концентрации:

$$\left(\frac{\partial^2 G^S}{\partial x_{As}^2} \right)_{T,P} < 0 \quad (3.1)$$

Граница спинодальной области, или кривая спинодали, определяется условием:

$$\left(\frac{\partial^2 G^S}{\partial x_{As}^2} \right)_{T,P} = 0. \quad (3.2)$$

Для твёрдого раствора, описываемого моделью регулярного раствора (уравнение 2.1), вторая производная свободной энергии Гиббса по мольной доле мышьяка (x_{As}) имеет вид:

$$\frac{\partial^2 G^S}{\partial x_{As}^2} = \frac{RT}{x_{As}(1-x_{As})} - 2\Omega^S \quad (3.3)$$

Приравнивая это выражение к нулю, получаем уравнение для кривой спинодали:

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ				
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата	Расчёт и анализ кривой спинодали в системе «кремний – мышьяк»	Лит.	Лист	Листов	
Разраб.		Хонин М.И.	<i>Хонин</i>						
Пров.		Пронин И.А.	<i>И.А. Пронин</i>	30.05.25			36	69	
Н.контр		Рыжова Т.Н.	<i>Т.Н. Рыжова</i>	11.06.25		Гр. 21ПД1			
Утв.									

$$\frac{RT}{x_{As}(1 - x_{As})} - 2\Omega^S = 0 \quad (3.4)$$

Отсюда можно выразить концентрацию x_{As} как функцию температуры T :

$$x_{As}^2 - x_{As} + \frac{RT}{2\Omega^S} = 0 \quad (3.5)$$

Решение этого квадратного уравнения относительно x_{As} даёт две ветви кривой спинодали:

$$x_{As,1}(T) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{1 - \frac{2RT}{\Omega^S}} \quad (3.6)$$

$$x_{As,2}(T) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 - \frac{2RT}{\Omega^S}} \quad (3.6)$$

Для расчёта кривой спинодали использовались следующие параметры:

- универсальная газовая постоянная: $R=8.31$ Дж/(моль·К);
- параметр взаимодействия для твёрдой фазы: $\Omega^S=w_s=63160$ Дж/моль.

Расчёт проводился в диапазоне температур от 700 до 1650 К.

Результаты расчёта кривой спинодали представлены на фазовой диаграмме (рисунок 3.1), где она показана пунктирными линиями внутри области твёрдого раствора.

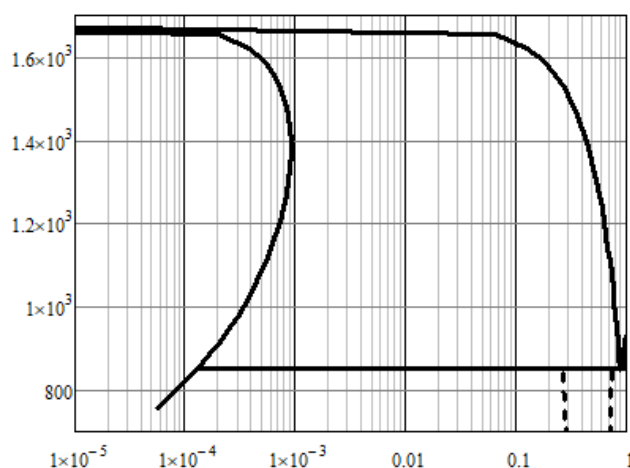


Рисунок 3.1 — Рассчитанная фазовая диаграмма системы «кремний – мышьяк» с кривой спинодали

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						37
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

На графике видно, что кривая спинодали (пунктирные линии) расположена внутри кривой бинодали (кривой растворимости), которая была определена в разделе 2.

Область между бинодалью и спинодалью является метастабильной, где фазовое разделение происходит путём зародышеобразования и роста. Область внутри спинодали является термодинамически нестабильной, и в ней происходит самопроизвольный спинодальный распад без необходимости преодоления энергетического барьера.

Для системы «кремний – мышьяк» наличие спинодальной области при относительно низких температурах (ниже 850 К) и высоких концентрациях мышьяка имеет важное практическое значение.

Это означает, что если высоколегированный кремний с As (например, после ионной имплантации и быстрого высокотемпературного отжига, который может привести к пересыщению твёрдого раствора) охлаждается или подвергается длительному отжигу при этих температурах, он может попасть в спинодальную область.

В такой ситуации происходит быстрое и гомогенное фазовое разделение, приводящее к образованию наноразмерных кластеров мышьяка или даже выделений фазы SiAs. Эти кластеры и преципитаты являются электрически неактивными, что приводит к деактивации значительной части легирующей примеси и, как следствие, к снижению концентрации свободных носителей заряда и ухудшению электропроводности материала.

Понимание формы и расположения кривой спинодали позволяет оптимизировать режимы термической обработки полупроводниковых приборов.

Например, для минимизации деактивации мышьяка необходимо избегать длительного пребывания материала в спинодальной области. Это может быть достигнуто путём использования очень коротких импульсных отжигов (например, лазерный отжиг), которые позволяют активировать примесь, но не дают

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						38
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

достаточно времени для развития спинодального распада и формирования кластеров.

Таким образом, расчёт и анализ кривой спинодали подтверждают термодинамическую тенденцию к фазовому разделению в высоколегированном кремнии с мышьяком и предоставляют важную информацию для контроля микроструктуры и электрических свойств полупроводниковых материалов.

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						39
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

4 Безопасность жизнедеятельности в полупроводниковой промышленности

Обеспечение безопасности жизнедеятельности (БЖД) является краеугольным камнем и первостепенной задачей при реализации любых научно-исследовательских и производственных процессов, особенно в высокотехнологичных отраслях, таких как полупроводниковая промышленность.

В данной сфере, ввиду применения высокотоксичных материалов, значительных температурных режимов, высоких электрических напряжений и потенциального воздействия ионизирующих излучений, соблюдение строгих правил безопасности приобретает критическое значение.

Настоящий раздел посвящен анализу и описанию ключевых аспектов безопасности, которые непосредственно применимы к работам с системой «кремний – мышьяк», а также к общим требованиям и передовому опыту в полупроводниковом производстве.

4.1 Химическая безопасность

Химическая и промышленная безопасность должна представлять надежную защиту сотрудников, организации и общества от возможных аварий и их последствий.

Вредные смеси проникают в организм через:

- дыхательные пути;
- кожные покровы;
- вместе с пищей.

На всех химических объектах устанавливается дозволённая норма концентрации химикатов и токсинов. Это уровень, исключая вызывание заболеваний или отклонений, и не влияющий на работоспособность сотрудника при ежедневном воздействии.

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ				
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата	Безопасность жизнедеятельности в полупроводниковой промышлен- ности	Лит.	Лист	Листов	
Разраб.		Хонин М.И.							
Пров.		Пронин И.А.		10.06.25			40	69	
Н.контр		Рыжова Т.Н.		11.06.25		Гр. 21ПД1			
Утв.									

Задачами общего значения являются те, специфика которых не изменяется в зависимости от вида производимой предприятием химической промышленности конечного продукта.

Таковыми являются:

- контроль ПДК рабочей зоны по токсичным смесям;
- замеры ДВК горючих газов и паров;
- измерение избытка/дефицита кислорода;
- типовые задачи контроля технологических процессов;
- постоянный мониторинг чистоты кислорода и водорода – продуктов разложения воды методом электролиза на электролизной станции;
- непрерывный контроль чистоты O_2 и N_2 – продуктов разделения воздуха на кислородно-разделительной станции;
- проверка дымовых газов, с расчетом валовых выбросов и прочие.

Для проведения данных мероприятий используется газоаналитические приборы, отличающиеся низким уровнем погрешности и быстротой обнаружения превышенных концентраций [48].

4.2 Электрическая безопасность

Современное производство характеризуется высоким уровнем потребления электрической энергии. Электричество, как и любой вид энергии, представляет потенциальную опасность для жизни и здоровья людей.

К факторам воздействия электричества на человеческий организм относятся:

- поражение электрическим током, то есть прохождение тока по отдельным частям тела и органам;
- тепловое и световое воздействие электрической дуги;
- влияние электрического поля.

Данный вид производственной деятельности регламентируется действующими «Правилами техники безопасности при эксплуатации электроустановок», также «Правилами техники безопасности при эксплуатации

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						41
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

электроустановок потребителей». Первый из документов касается организаций, занимающихся производством или распределением электроэнергии, второй — организаций потребителей.

Правилами предусмотрен ряд мероприятий организационного и технического характера, среди которых:

- оформление выполняемых работ специальным нарядом-допуском, или распоряжением в порядке текущей эксплуатации (последнее допускается только в электроустановках потребителей до 1000 В, на отключенном с обеих сторон электрическом оборудовании);
- соблюдение процедур допуска бригад на рабочее место, надзора, перерывов в работе и её окончания;
- подготовка рабочего места, в которую входит выполнение необходимых отключений, наложение заземлений, вывешивание плакатов и установка ограждений.

Выполнение технических мероприятий, также как и самих работ осуществляется с применением электрозащитных средств, к которым относятся:

- диэлектрические перчатки, галоши и коврики;
- указатели напряжения и изолирующие штанги;
- инструменты с диэлектрическими рукоятками.

Все перечисленные средства индивидуальной защиты (СИЗ), за исключением диэлектрических ковриков (которые осматриваются), подвергаются периодическим испытаниям повышенным напряжением. На каждом из этих средств защиты должна присутствовать табличка или штамп с указанием номинального напряжения, в электроустановках которых они могут быть применены. Кроме этого, указывается дата следующего испытания и наименование лаборатории, проводившей испытания. Применение средств защиты, не подвергшихся очередному испытанию в срок, недопустимо.

Испытания средств индивидуальной защиты могут выполнять только лаборатории, зарегистрированные в Ростехнадзоре.[49]

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						42
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

4.3 Термическая безопасность

Характеристика потенциальных источников опасности в производственных условиях включает в себя различные устройства и оборудование, которые могут представлять риск для работников.

Вот несколько примеров:

1. Плавильные печи: могут создавать опасности, связанные с воздействием химических веществ, возможностью ожогов кожи и тепловым излучением.
2. Оборудование для сварки и пайки: сварочное и паяльное оборудование, такое как механические, электрические и лазерные устройства, может вызвать опасности в виде ожогов, воздействия теплового излучения и химических веществ.
3. Газогенераторы и вакуумные печи, и камеры: могут вызвать опасности в виде ожогов кожи, теплового излучения и химического воздействия.
4. Сжатые и сжиженные газы: обращение с сжатыми и сжиженными газами требует особой осторожности. Опасности включают в себя возможность удара жидкостью или газом под давлением, обморожение мягких тканей из-за контакта с холодными поверхностями, а также риск возгорания и взрыва.

Для эффективного управления и контроля опасных ситуаций в рабочей среде рекомендуется внедрять разнообразные меры предосторожности.

Среди основных подходов стоит выделить:

1. Закрытые системы и ограждения: использование закрытых систем и ограждений для горячих сред способствует предотвращению контакта работников с опасными веществами. Установка изоляции и разделяющих устройств также помогает уменьшить риск воздействия опасных факторов.
2. Обучение и инструктажи: проведение систематического обучения и инструктажей среди работников снижает вероятность несчастных случаев. Проверки знаний, визуальные и звуковые предупреждающие сигналы, а также правила поведения на рабочих местах оказываются важными элементами обучающей программы.

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						43
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

3. Применение СИЗ: применение спецодежды, спецобуви, средств защиты рук и головных уборов обеспечивает дополнительную защиту от вредных воздействий. Работники должны быть оснащены соответствующими СИЗ, такими как защитные костюмы, маски, очки и другие средства, обеспечивающие безопасность при работе в опасных условиях.

4. Рациональное чередование режимов труда и отдыха: правильное распределение рабочего времени и перерывов способствует уменьшению усталости и повышению производительности.

5. Рациональное размещение оборудования: правильное размещение оборудования на рабочем месте способствует оптимальной работе и уменьшению риска травм и аварий [50].

4.4 Радиационная безопасность

Основными принципами обеспечения радиационной безопасности являются:

- принцип нормирования - непревышение допустимых пределов индивидуальных доз облучения граждан от всех источников ионизирующего излучения;
- принцип обоснования - запрещение всех видов деятельности по использованию источников ионизирующего излучения, при которых полученная для человека и общества польза не превышает риск возможного вреда, причиненного дополнительным к естественному радиационному фону облучением;
- принцип оптимизации - поддержание на возможно низком и достижимом уровне с учетом экономических и социальных факторов индивидуальных доз облучения и числа облучаемых лиц при использовании любого источника ионизирующего излучения [51].

4.5 Безопасность в чистых помещениях

Одним из главных факторов, который сдерживает распространение загрязняющих частиц и повышение их концентрации, является движение воздушных потоков в чистом помещении. Вентиляция в комнатах с особыми требованиями организована так, что воздух движется строго ламинарно. Быстрые перемещения или движения персонала способны формировать турбулентные

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						44
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

потоки, что приводит к переносу частиц на рабочую поверхность и оборудование. Поэтому движения сотрудников должны быть неспешными, плавными, продуманными, без лишних перемещений.

Соблюдение требований дисциплины – основа обеспечения необходимого уровня чистоты:

1. К работе в чистом помещении должны допускаться только те сотрудники, которые не имеют заболеваний, находятся в здоровой физической форме.
2. Персонал обязан пройти подготовку, соблюдать установленные требования.
3. Все операции должны проводиться только в чистой специальной одежде.
4. Внутри зоны не должно быть запрещенных предметов и материалов.
5. Обычное оборудование и технику применять нельзя, любые аппараты от приборов до телефонов должны иметь допуск для использования в чистых помещениях.

Список предметов, которые не должны находиться на рабочем месте, довольно большой. Это любые личные вещи, включая пищу, косметику, сигареты, сумки и косметички, лекарства. Также под запретом все, что способно выделять загрязняющие частицы: аэрозоли, абразивные средства, ткань, древесина, картон и обычная бумага, упаковка, которая не прошла обработку. Непредусмотренные протоколом принтеры. ПК, телефоны, аудиосистемы, инструменты и приборы запрещено применять в чистых помещениях. Не разрешено использовать печатную продукцию, обычные карандаши, стирательные резинки и корректоры. Для эффективной работы в чистых помещениях необходимо правильно их спроектировать и предусмотреть отдельную комнату для сбережения личных вещей и переодевания персонала [52].

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						45
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе был выполнен расчёт и анализ равновесий в полупроводниковой системе «кремний – мышьяк».

Результаты работы показали, что растворимость мышьяка в твёрдом кремнии ограничена, что необходимо учитывать при легировании. Расчёт спинодального распада выявил условия, при которых возможно образование нежелательных кластеров, снижающих электрическую активность примеси.

Проведённая работа вносит вклад в понимание термодинамических процессов в системе Si-As и предоставляет основу для дальнейших разработок в области микро- и нанoeлектроники

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						46
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Sze S. M., Li Y., Ng K. K. *Physics of semiconductor devices*. – John Wiley & sons, 2021.
2. Kittel C., McEuen P. *Introduction to solid state physics*. – John Wiley & Sons, 2018.
3. Pierret R. F. *Semiconductor device fundamentals*. – Pearson Education India, 1996.
4. Streetman B. G. et al. *Solid state electronic devices*. – New Jersey : Prentice hall, 2000. – Т. 4. – С. 202-203.
5. Wolf S. *Silicon processing for the VLSI era //LATTICE*. – 1995. – С. 559-581.
6. Plummer J. D., Griffin P. B. *Material and process limits in silicon VLSI technology //Proceedings of the IEEE*. – 2002. – Т. 89. – №. 3. – С. 240-258.
7. Singh Y. *Semiconductor devices*. – IK International Pvt Ltd, 2013.
8. Walukiewicz W. *Defects and self-compensation in semiconductors //Wide-gap chalcopyrites*. – Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2006. – С. 35-54.
9. Fahey P. M., Griffin P. B., Plummer J. D. *Point defects and dopant diffusion in silicon //Reviews of modern physics*. – 1989. – Т. 61. – №. 2. – С. 289.
10. Jones R., Briddon P. R. *The ab initio cluster method and the dynamics of defects in semiconductors //Semiconductors and Semimetals*. – Elsevier, 1998. – Т. 51. – С. 287-349.
11. Cowern N. E. B. et al. *Energetics of self-interstitial clusters in Si //Physical Review Letters*. – 1999. – Т. 82. – №. 22. – С. 4460.
12. Nobili D. et al. *Precipitation as the phenomenon responsible for the electrically inactive arsenic in silicon //Journal of the Electrochemical Society*. – 1983. – Т. 130. – №. 4. – С. 922.
13. Reddy A. J. et al. *Defect states at silicon surfaces //Physica B: Condensed Matter*. – 1999. – Т. 273. – С. 468-472.

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		47

14. Masetti G., Severi M., Solmi S. Modeling of carrier mobility against carrier concentration in arsenic-, phosphorus-, and boron-doped silicon //IEEE Transactions on electron devices. – 2005. – T. 30. – №. 7. – C. 764-769.
15. Hu S. M. Diffusion in silicon and germanium //Atomic Diffusion in Semiconductors. – Boston, MA : Springer US, 1973. – C. 217-350.
16. Ryssel H. Ion implantation into semiconductors: Historical perspectives //Semiconductors and Semimetals. – Elsevier, 1997. – T. 45. – C. 1-29.
17. Lieberman M. A., Lichtenberg A. J. Principles of plasma discharges and materials processing //MRS Bulletin. – 1994. – T. 30. – №. 12. – C. 899-901.
18. Sedgwick T. O. Rapid thermal processing, an integral part of shallow junction formation //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 1989. – T. 37. – C. 760-765.
19. Bean J. C. Silicon-based semiconductor heterostructures: column IV bandgap engineering //Proceedings of the IEEE. – 2002. – T. 80. – №. 4. – C. 571-587.
20. Herman M. A., Sitter H. Molecular beam epitaxy: fundamentals and current status. – Springer Science & Business Media, 2012. – T. 7.
21. Fair R. B., Wivell H. W. Zener and avalanche breakdown in As-implanted low-voltage Si np junctions //IEEE Transactions on Electron Devices. – 1976. – T. 23. – №. 5. – C. 512-518.
22. Huang H. L. Laser Spike Annealing of III-V Materials and Full-Field Thermal Imaging during Laser Spike Annealing. – 2018.
23. Pinacho R. et al. Modeling arsenic deactivation through arsenic-vacancy clusters using an atomistic kinetic Monte Carlo approach //Applied Physics Letters. – 2005. – T. 86. – №. 25.
24. Trumbore F. A. Solid solubilities of impurity elements in germanium and silicon //Bell System Technical Journal. – 1960. – T. 39. – №. 1. – C. 205-233.

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						48
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

25. Wilson R. G., Stevie F. A., Magee C. W. *Secondary ion mass spectrometry: a practical handbook for depth profiling and bulk impurity analysis* //(No Title). – 1989.
26. Armigliato A. et al. *Electron microscopy of As supersaturated silicon* //Journal of the Electrochemical Society. – 1986. – T. 133. – №. 12. – C. 2560.
27. Eriksson L. et al. *Implantation and annealing behavior of Group III and V dopants in silicon as studied by the channeling technique* //Journal of Applied Physics. – 1969. – T. 40. – №. 2. – C. 842-854.
28. Kim Y. et al. *First-principles studies of small arsenic interstitial complexes in crystalline silicon* //Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics. – 2009. – T. 79. – №. 7. – C. 075201.
29. Nobili D. et al. *Precipitation, aggregation, and diffusion in heavily arsenic-doped silicon* //Physical Review B. – 1994. – T. 49. – №. 4. – C. 2477.
30. Fair R. B., Li S. *Photonic effects in the deactivation of ion implanted arsenic* //Journal of applied physics. – 1998. – T. 83. – №. 8. – C. 4081-4090.
31. Aboy M. et al. *Modeling of defects, dopant diffusion and clustering in silicon* //Journal of Computational Electronics. – 2014. – T. 13. – C. 40-58.
32. Massalski T. B. et al. (ed.). *Binary alloy phase diagrams*. – Metals Park, OH : American society for metals, 1986. – T. 1. – №. 2.
33. Mueller D. C., Alonso E., Fichtner W. *Arsenic deactivation in Si: Electronic structure and charge states of vacancy-impurity clusters* //Physical Review B. – 2003. – T. 68. – №. 4. – C. 045208.
34. Lieberman M. A., Lichtenberg A. J. *Principles of plasma discharges and materials processing* //MRS Bulletin. – 1994. – T. 30. – №. 12. – C. 899-901.
35. Fair R. B., Tsai J. C. C. *The Diffusion of Ion-Implanted Arsenic in Silicon* //Journal of the Electrochemical Society. – 1975. – T. 122. – №. 12. – C. 1689.
36. Harrison S. A., Edgar T. F., Hwang G. S. *Interaction between interstitials and arsenic-vacancy complexes in crystalline silicon* //Applied physics letters. – 2004. – T. 85. – №. 21. – C. 4935-4937.

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		49

37. Feynson A., Zemel J. N. *Rapid thermal annealing of arsenic-implanted silicon: A review* //Thin solid films. – 1988. – T. 165. – №. 1. – С. 109-138.
38. Gaskell D. R. *Introduction to the Thermodynamics of Materials* //MRS BULLETIN. – 2004. – С. 975.
39. Hillert M. *Phase equilibria, phase diagrams and phase transformations: their thermodynamic basis.* – Cambridge university press, 2007.
40. Cahn J. W. *On spinodal decomposition* //Acta metallurgica. – 1961. – T. 9. – №. 9. – С. 795-801.
41. Schwartz L. H., Cohen J. B. *Diffraction from materials.* – Springer Science & Business Media, 2013.
42. Saunders N., Miodownik A. P. (ed.). *CALPHAD (calculation of phase diagrams): a comprehensive guide.* – Elsevier, 1998. – T. 1.
43. Ansara I. *Thermodynamic Modeling of Solution Phases and Phase Diagram Calculations* //Materials Chemistry at High Temperatures: Characterization. – 1990. – С. 215-229.
44. Kohn W., Sham L. J. *Self-consistent equations including exchange and correlation effects* //Physical review. – 1965. – T. 140. – №. 4A. – С. A1133.
45. Binder K. *Monte Carlo simulations in statistical physics* //Statistical and nonlinear physics. – New York, NY : Springer US, 2022. – С. 85-97.
46. Zepeda-Ruiz L. A., Gilmer G. H. *Monte Carlo simulations of crystal growth* //Handbook of crystal growth. – Elsevier, 2015. – С. 445-475.
47. Chen L. Q. *Phase-field models for microstructure evolution* //Annual review of materials research. – 2002. – T. 32. – №. 1. – С. 113-140.
48. Безопасность химических предприятий — RTECO. URL: <https://rteco.ru/khimicheskaya-promyshlennost/bezopasnost-himicheskikh-predpriyatij/> (дата обращения: 26.05.2025).
49. Электробезопасность на производстве. URL: https://t-zamer.ru/v-pomosh-energetiku/elektrobezopasnost_na_proizvodstve/ (дата обращения: 26.05.2025).

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		50

50. Термические опасности: ключевые меры безопасности с учетом оценки профессиональных рисков. URL: <https://centr-utm.ru/poleznoe/termicheskie-opasnosti-klyuchevye-mery-bezopasnosti-s-uchetom-otsenki-professionalnykh-riskov/> (дата обращения: 01.06.2025).

51. Принципы обеспечения радиационной безопасности. URL: <https://base.garant.ru/10108778/5ac206a89ea76855804609cd950fc9f7/> (дата обращения: 01.06.2025).

52. Основы поведения в чистых помещениях. URL: <https://base.garant.ru/10108778/5ac206a89ea76855804609cd950fc9f7/> (дата обращения: 01.06.2025).

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						51
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

ПРИЛОЖЕНИЕ А

(обязательное)

Задание на выпускную квалификационную работу

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						52
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

«Утверждаю»
зав. кафедрой НиМЭ
Пронин И.А.
(фамилия, инициалы)
«05» июня 2025 г.

З А Д А Н И Е
на бакалаврскую работу

1. Студент гр. 21ПД1 факультета информационных технологий и электроники

Направление подготовки 11.03.04. «Электроника и нанoeлектроника»

Профиль Микроэлектроника и твердотельная электроника

Хонин Михаил Иванович

(фамилия, имя, отчество)

2. Руководитель Пронин Игорь Александрович

(фамилия, имя, отчество)

3. Тема бакалаврской работы

Расчёт равновесий в полупроводниковой системе «кремний – мышьяк»

Тема утверждена приказом ПГУ № 582/0 от «25» 04 2025 г.

4. Техническое задание на бакалаврскую работу (вид работы: разработка, проектирование, исследование, и т.д.; назначение; основные параметры; условия функционирования и т.д.)

Исследовать фазовые равновесия в системе «кремний мышьяк» в рамках модели регулярных твердых растворов. Рассчитать диаграмму плавкости системы, рассчитать положение спинодали.

Основные параметры:

Диапазон температур – 500 – 1414,85 °С.

Давление – 1 бар.

Максимальная концентрация мышьяка – 50 ат. %

5. Объем и содержание основной части бакалаврской работы

5.1. Пояснительная записка (перечень вопросов, подлежащих разработке, обоснований, описаний, расчетов и т.д.)

1. Литературный обзор по теме равновесий в полупроводниковой системе «кремний – мышьяк»

2. Расчёт равновесия «твердая фаза – жидкая фаза» в системе «кремний – мышьяк».

3. Расчёт и анализ кривой спинодали в системе «кремний – мышьяк»

4. Безопасность жизнедеятельности в полупроводниковой промышленности

5.2. Иллюстративная часть (перечень и содержание чертежей и слайдов презентации)

1 слайд – актуальность проведенной работы

2 слайд – диаграммы плавкости систем «полупроводник – примесь»

3 слайд – алгоритм расчёта диаграмм плавкости

4 слайд – модель регулярных растворов

5 слайд – расчёт положений ликвидуса и солидуса

6 слайд – диаграмма плавкости системы «кремний – мышьяк»

7 слайд – спинодальный распад твердых растворов

8 слайд – расчёт положения спинодали

9 слайд – диаграмма плавкости системы «кремний – мышьяк» с линией спинодали

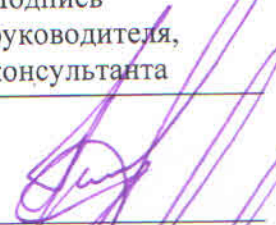
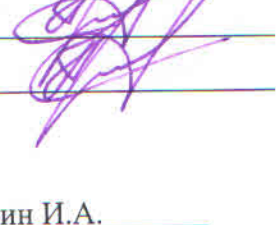
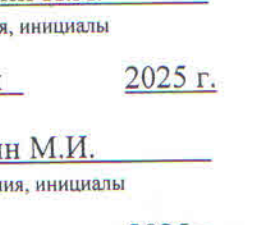
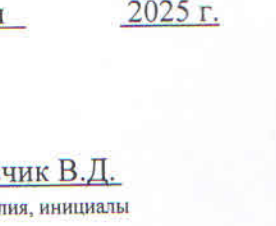
10 слайд – выводы о работе

6. Консультанты и содержание дополнительных разделов

6.1.

Консультант

7. Календарный график по выполнению бакалаврской работы

Наименование этапов работы	Объем работы	Срок выполнения	Подпись руководителя, консультанта
Литературный обзор по теме равновесий в полупроводниковой системе «кремний – мышьяк»	25 %	05.06.2025	
Расчёт равновесия «твердая фаза – жидкая фаза» в системе «кремний – мышьяк»	25 %	06.06.2025	
Расчёт и анализ кривой спинодали в системе «кремний – мышьяк»	25 %	07.06.2025	
Безопасность жизнедеятельности в полупроводниковой промышленности	15 %	08.06.2025	
Графическая часть	5 %	09.06.2025	
Оформление пояснительной записки	5 %	09.06.2025	

Руководитель бакалаврской работы

подпись

Пронин И.А.

фамилия, инициалы

Дата выдачи задания

«05»

июня

2025 г.

Задание к исполнению принял

подпись

Хонин М.И.

фамилия, инициалы

«05»

июня

2025 г.

Бакалаврскую работу к защите допустить

Декан факультета

подпись

Кревчик В.Д.

фамилия, инициалы

« 11 »

июня

2025 г.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

(обязательное)

Заявление и протокол проверки ВКР на оригинальность в системе
«Антиплагиат.ВУЗ»

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						56
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

Ректору Пензенского государственного
университета Гулякову А.Д. от
студента 4 курса ФИТЭ очной формы
обучения
Хонина Михаила Ивановича

ЗАЯВЛЕНИЕ

Я, Хонин Михаил Иванович, студент 4 курса очной формы обучения направления подготовки 11.03.04 «Электроника и наноэлектроника», «Микроэлектроника и твердотельная электроника», прошу провести проверку с использованием системы «Антиплагиат.ВУЗ» бакалаврской выпускной квалификационной работы на тему «Расчёт равновесий в полупроводниковой системе «кремний – мышьяк»», выполненной мной самостоятельно, на содержание элементов плагиата.

Все прямые заимствования из печатных и электронных источников, а также из защищенных ранее выпускных квалификационных работ, кандидатских и докторских диссертаций имеют соответствующие ссылки.

Я ознакомлен с действующим Стандартом университета «Выпускная квалификационная работа обучающихся по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета и программам магистратуры», согласно которому обнаружение плагиата является основанием для недопуска ВКР к защите и отчисления из университета.

ВКР представлена на проверку «10» 06 2025 год
Руководитель ВКР Пронин И.А.



Подпись студента

Протокол

проверки на оригинальность в системе «Антиплагиат.ВУЗ» выпускной бакалаврской работы на тему «Расчёт равновесий в полупроводниковой системе «кремний – мышьяк»»

студента 4 курса Хонина Михаила Ивановича

направления подготовки 11.03.04 «Электроника и нанoeлектроника»,

профиль «Микроэлектроника и твердотельная электроника»

Руководитель ВКР Пронин И.А.



СПРАВКА

о результатах проверки текстового документа
на наличие заимствований

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего
образования «Тюменский государственный
университет»

ПРОВЕРКА ВЫПОЛНЕНА В СИСТЕМЕ ANTIPLAGIAT.VUZ

Автор работы: Хонин Михаил Иванович
Смектирование: Хонин Михаил Иванович
расчитано для: Расчет равновесий в полупроводниковой системе «кремний мышьяк»
Название работы: Выпускная квалификационная работа
Тип работы: Кафедра "Нано- и микроэлектроника"
Подразделение:

РЕЗУЛЬТАТЫ

■ отчет о проверке корректно выполнен, ниже представлены результаты проверки до корректур

СОБЛЮДЕНИЕ	12.53%	СОБЛЮДЕНИЕ	12.53%
ОРИГИНАЛЬНОСТЬ	86.39%	ОРИГИНАЛЬНОСТЬ	86.39%
ЦИТИРОВАНИЕ	1.09%	ЦИТИРОВАНИЕ	1.09%
САМОЦИТИРОВАНИЕ	0%	САМОЦИТИРОВАНИЕ	0%

ДАТА ПОСЛЕДНЕЙ ПРОВЕРКИ: 10.06.2025

ДАТА И ВРЕМЯ КОРРЕКТУРЫ: 10.06.2025 12:23

Структура
документа:
Модуль поиска:

Проверенные разделы: основная часть с.1-3, 15-41, введение с.4-15, выводы с.42

Исследованные источники: ИСЭ; ИСЭ Адмлет; Диссертации ИСЭ; Цитирование: Шаблоны фразы; Перефразирование по коллекции ИСЭ; Переводные заимствования; Медицина; Патенты СССР, РФ, СНГ; Публикации eLIBRARY; Публикации РГБ (переводы и перефразирование); СМИ России и СНГ; СПО ГАРАНТ; нормативно-правовая документация; Кольцо вузов; Переводные заимствования ИСЭ; Перефразированные заимствования по коллекции Интернет в английском сегменте; Перефразированные заимствования по коллекции Интернет в русском сегменте; Переводные заимствования по коллекции Интернет в английском сегменте; Публикации РГБ; Переводные заимствования по коллекции Гарант; аналитика; Коллекция ИСЭ; Сводная коллекция ИСЭ; Публикации eLIBRARY (переводы и перефразирование); Переводные заимствования по...

Работу проверил: Головинский Алексей Николаевич

Дата подписи: 10.06.25



Чтобы убедиться
в подлинности скана, используйте QR код,
который содержит ссылку на отчет.

Ответ на вопрос, является ли обнаруженное заимствование
авторским, система оставляет на усмотрение проверяющего.
Предоставленная информация не подлежит копированию
в коммерческие цели.

«10» 06 2025 год

подпись

Пронин И.А.
фамилия, инициалы



АНТИПЛАГИАТ
ОБНАРУЖЕНИЕ ЗАИМСТВОВАНИЙ

СПРАВКА

о результатах проверки текстового документа
на наличие заимствований

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего
образования "Пензенский государственный
университет"

ПРОВЕРКА ВЫПОЛНЕНА В СИСТЕМЕ АНТИПЛАГИАТ.ВУЗ

Автор работы: Хонин Михаил Иванович
Самоцитирование
рассчитано для: Хонин Михаил Иванович
Название работы: Расчет равновесий в полупроводниковой системе «кремний-мышьяк»
Тип работы: Выпускная квалификационная работа
Подразделение: Кафедра "Нано- и микроэлектроника"

РЕЗУЛЬТАТЫ

■ ОТЧЕТ О ПРОВЕРКЕ КОРРЕКТИРОВАЛСЯ: НИЖЕ ПРЕДСТАВЛЕНЫ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОВЕРКИ ДО КОРРЕКТИРОВКИ

СОВПАДЕНИЯ	12.53%	СОВПАДЕНИЯ	12.53%
ОРИГИНАЛЬНОСТЬ	86.39%	ОРИГИНАЛЬНОСТЬ	86.39%
ЦИТИРОВАНИЯ	1.09%	ЦИТИРОВАНИЯ	1.09%
САМОЦИТИРОВАНИЯ	0%	САМОЦИТИРОВАНИЯ	0%

ДАТА ПОСЛЕДНЕЙ ПРОВЕРКИ: 10.06.2025

ДАТА И ВРЕМЯ КОРРЕКТИРОВКИ: 10.06.2025 13:23

Структура
документа:

Проверенные разделы: основная часть с.1-3, 15-41, введение с.4-15, выводы с.42

Модули поиска:

IEEE; ИПС Адилет; Диссертации НББ; Цитирование; Шаблонные фразы; Перефразирования по коллекции IEEE; Переводные заимствования; Медицина; Патенты СССР, РФ, СНГ; Публикации eLIBRARY; Публикации РГБ (переводы и перефразирования); СМИ России и СНГ; СПС ГАРАНТ; нормативно-правовая документация; Кольцо вузов; Переводные заимствования IEEE; Перефразированные заимствования по коллекции Интернет в английском сегменте; Перефразированные заимствования по коллекции Интернет в русском сегменте; Переводные заимствования по коллекции Интернет в английском сегменте; Публикации РГБ; Переводные заимствования по коллекции Гарант: аналитика; Коллекция НБУ; Сводная коллекция ЭБС; Публикации eLIBRARY (переводы и перефразирования); Переводные заимствования по...

Работу проверил: Головяшкин Алексей Николаевич

ФИО проверяющего

Дата подписи:

10.06.2025

Подпись проверяющего



Чтобы убедиться
в подлинности справки, используйте QR-код,
который содержит ссылку на отчет.

Ответ на вопрос, является ли обнаруженное заимствование
корректным, система оставляет на усмотрение проверяющего.
Предоставленная информация не подлежит использованию
в коммерческих целях.

ПРИЛОЖЕНИЕ В
(обязательное)
Презентация ВКР

					ПГУ 2. 11.03.04. 017 ПЗ	Лист
						59
Изм.	Лист	№докум	Подп.	Дата		

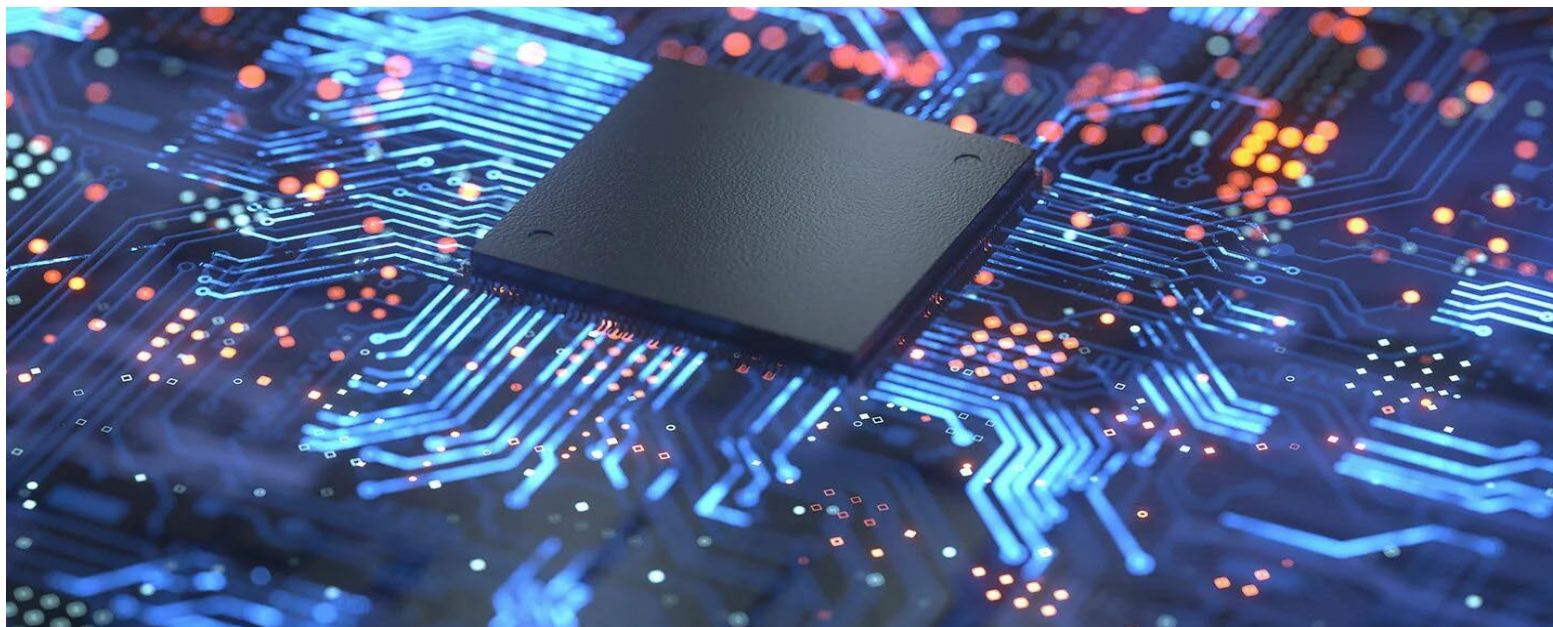
Расчёт равновесий в полупроводниковой системе «кремний – мышьяк»

Выполнил студент группы 21ПД1: Хонин М.И.

Научный руководитель: Пронин И.А.

Актуальность проведенной работы

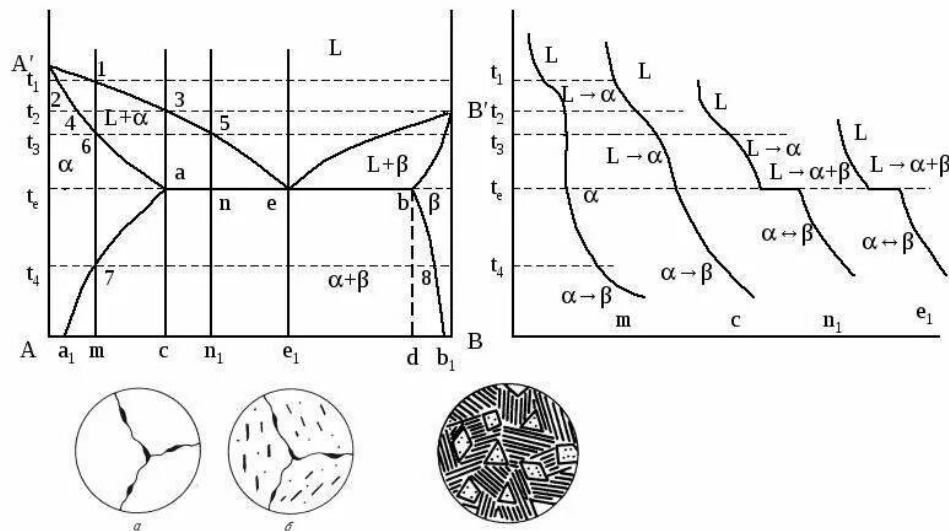
- Кремний играет ключевую роль в nano- и микроэлектронике.
- Электрофизические свойства кремния зависят от типа и концентрации легирующих примесей.
- Мышьяк (As) — одна из основных примесей для создания n -типа проводимости в кремнии.
- Актуальность работы: расчет фазовых равновесий в системе «кремний – мышьяк» позволяет оптимизировать процессы легирования и минимизировать дефекты.



Диаграммы плавкости систем «полупроводник – примесь»

- Типичная диаграмма плавкости для систем на основе кремния имеет эвтектический характер.
- Основные фазы: жидкая, твёрдые растворы на основе компонентов, области смеси фаз.
- Линии $a - a_1$ и $b - b_1$ определяют пределы растворимости примеси.

Диаграмма состояния системы с
эвтектическим превращением и
граничными твердыми растворами



Алгоритм расчёта диаграмм плавкости

- Условия термодинамического равновесия:
 - Равенство температур и давлений во всех сосуществующих фазах.
 - Равенство химических потенциалов компонентов во всех сосуществующих фазах.
- Основные этапы:
 - Выбор модели раствора (идеальный, регулярный и др.).
 - Расчёт свободной энергии Гиббса для каждой фазы.
 - Решение уравнений для ликвидуса и солидуса.

Модель регулярных растворов

- Учитывает взаимодействие между частицами разных сортов.
- Свободная энергия Гиббса:

$$G^k = x_{As}G_{As}^{0,k} + x_{Si}G_{Si}^{0,k} + RT(x_{As}\ln x_{As} + x_{Si}\ln x_{Si}) + \Omega^k x_{As}x_{Si}$$

- Энтропия определяется комбинационной энтропией идеальных газов.

Расчёт положений ликвидуса и солидуса

- Используются уравнения для химических потенциалов в жидкой и твёрдой фазах.
- Параметры для системы «кремний – мышьяк»:
 - $\Omega^s = 63160$ Дж/моль,
 - $\Omega^L(T) = (-17.33 + 5.1 \cdot 10^{(-3)} \cdot T) \cdot 10^3$ Дж/моль.
- Результаты: ретроградный характер растворимости мышьяка в кремнии.

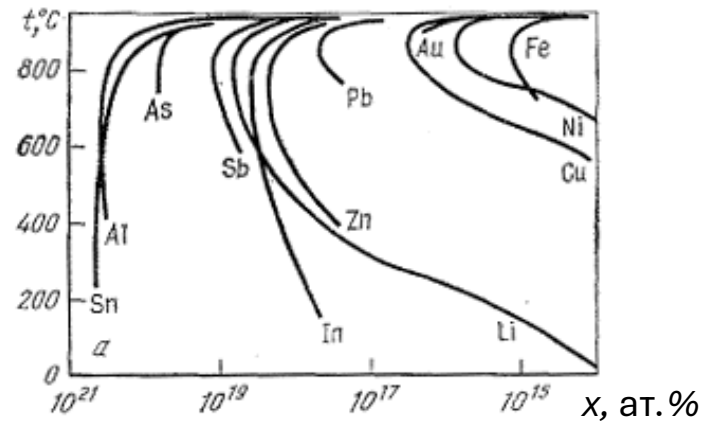
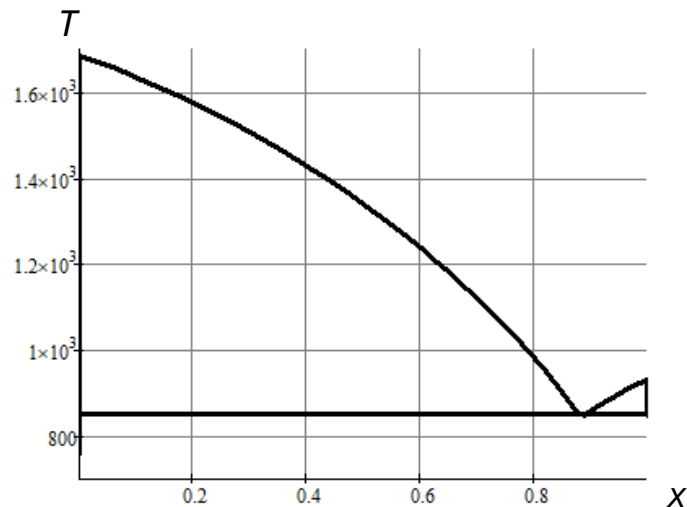
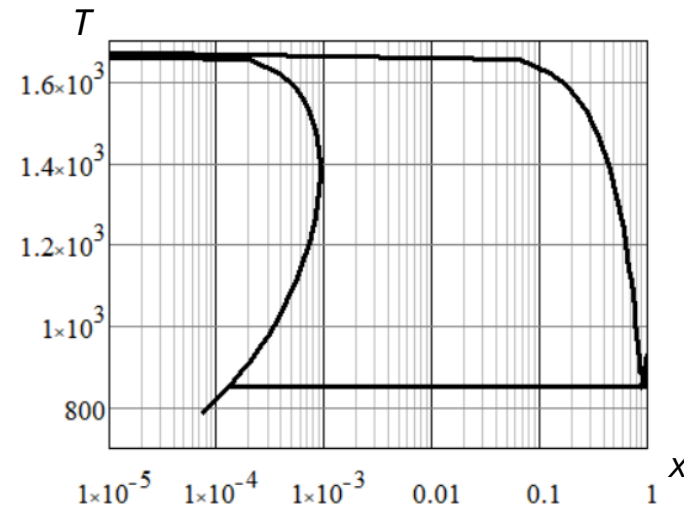


Диаграмма плавкости системы «кремний – мышьяк»

- Кривые ликвидуса и солидуса показывают:
 - Низкую растворимость As в твёрдом кремнии.
 - Эвтектическую точку при 848 К.
- Максимальная атомная доля As в твердом растворе: ~0.01%.



Спинодальный распад твёрдых растворов

- Механизм фазового разделения без энергетического барьера.
- Условие спинодального распада:

$$\left(\frac{\partial^2 G^S}{\partial x^2}\right) < 0.$$

- Приводит к образованию наноразмерных кластеров As, снижающих электрическую активность.

Расчёт положения спинодали

- Уравнение для кривой спинодали:

$$\frac{RT}{x_{As}(1 - x_{As})} - 2\Omega^S = 0$$

- Решение даёт две ветви кривой спинодали для системы Si-As.

1 – Ликвидус и Солидус

2 – Бинодаль

3 – Спинодаль

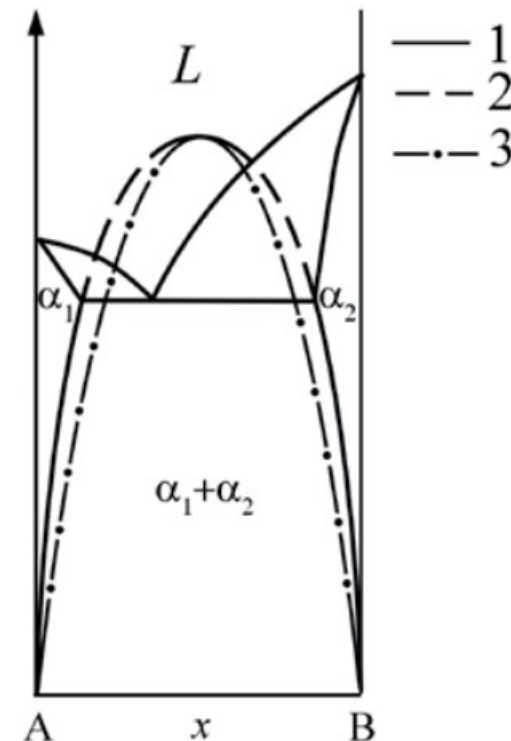
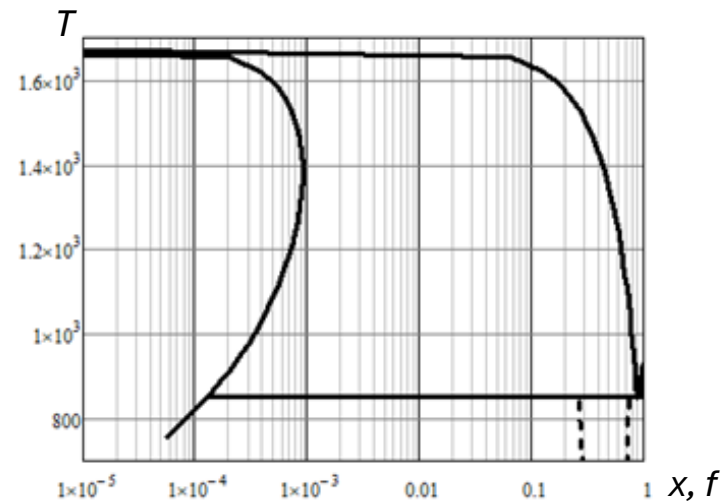


Диаграмма плавкости с линией спинодали

- Спинодаль расположена внутри кривой растворимости.
- Область между спинодалью и бинодалью — метастабильная.
- Практическое значение: избегать длительных отжигов в спинодальной области.



Выводы о работе

1. Проведён расчёт фазовых равновесий в системе «кремний – мышьяк» с использованием модели регулярных растворов.
2. Установлен ретроградный характер растворимости As в Si.
3. Определены условия спинодального распада, ведущего к деактивации примеси.
4. Результаты полезны для оптимизации технологий легирования в микро- и нанoeлектронике.

Спасибо за внимание!