

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КОМПОНЕНТОВ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ ГЕРМАНИЙ-КРЕМНИЙ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ МЕТОДОМ БРИДЖМЕНА

П.Г. АЖДАРОВ, Н.А. АГАЕВ.
Институт Физики АН Азербайджана,
370143, Баку, ул.Г.Джавида, 33.

Решена задача распределения компонентов в кристаллах твердых растворов германий-кремний, выращенных методом Бриджмена, с учетом зависимости коэффициента распределения второго компонента (Si) от состава расплава. Рассчитаны зависимости распределения кремния вдоль слитков для различных исходных составов расплава системы Ge-Si. Проведен анализ полученных зависимостей для определения оптимальных условий выращивания кристаллов Ge-Si различного состава.

В ряду полупроводниковых твердых растворов особую значимость имеет система германий-кремний, составные компоненты которой лежат в основе современной микро- и оптоэлектроники. В работах [1-4] были рассмотрены теоретические вопросы распределения компонентов в кристаллах германий-кремний, выращенных методом вытягивания из расплава с использованием подпитывающих слитков. Основная цель этих работ заключалась в определении участков кристаллов с однородным распределением компонентов, а также в управлении составом этих участков путем изменения режима кристаллизации и подпитывания расплава. Расчеты проводились авторами в приближении постоянства коэффициента сегрегации компонентов системы.

В настоящей работе решается задача распределения компонентов в кристаллах Ge-Si, выращенных методом Бриджмена, с учетом сложного характера изменения коэффициента сегрегации компонентов с составом кристалла. Решение задачи демонстрирует возможность определения оптимальных условий получения кристаллов Ge-Si с определенным градиентом концентраций компонентов и однородных сплавов с требуемым составом.

Задачу решали при выполнении следующих условий: фронт кристаллизации в сечениях, параллельных поверхности раздела фаз, плоский; диффузия компонентов в твердой фазе пренебрежимо мала по сравнению с таковой в расплаве; диффузия в расплаве протекает со скоростью обеспечивающей равномерность состава жидкой фазы по всему объему; на фронте кристаллизации существует равновесие между жидкой и твердой фазами, определяемое диаграммой состояния системы Ge-Si, т.е. значение коэффициента сегрегации компонентов равен равновесному. Отметим, что для системы Ge-Si эти условия практически выполняются при скоростях кристаллизации не более 5 мм/час [5].

Введем следующие обозначения: V_0 , V_p - объемы расплава в начальный и данный момент кристаллизации; V_k - объем расплава, кристаллизующегося в единицу времени; C - общее количество второго компонента (Si) в расплаве; c_p , c_k - концентрации второго компонента в

расплаве, и в кристалле, соответственно; K - равновесный коэффициент сегрегации второго компонента; t - время.

Учитывая, что $c_p = C/V_p$ имеем:

$$\frac{dc_p}{dt} = \frac{\dot{C}V_p - \dot{V}_p C}{V_p^2} \quad (1)$$

По условию задачи считаем V_k постоянным и тогда

$$\begin{aligned} V_p &= V_0 - V_k t, \quad \dot{V}_p = -V_k, \\ \dot{C} &= -V_k c_k = -V_k c_p \cdot K \end{aligned} \quad (2)$$

Подставляя в (1) данные (2), получим

$$\frac{dc_p}{dt} = \frac{V_k c_p - \dot{V}_p c_p K}{V_0 - V_k t} \quad (3)$$

Разделяя переменные и интегрируя, находим

$$\int_{c_p^0}^{c_p} \frac{dc_p}{c_p - c_p K} = \ln \frac{V_0}{V_0 - V_k t} \quad (4)$$

Здесь c_p^0 - концентрация второго компонента в расплаве до начала кристаллизации. Обозначив $V_k t / V_0$ символом γ , который отражает долю закристаллизовавшегося расплава, уравнение (4) можно записать в виде

$$\gamma = 1 - \exp \left(- \int_{c_p}^{c_p^0} \frac{dc_p}{c_p K - c_p} \right) \quad (5)$$

Решение интеграла в (5) возможно, если известна аналитическая зависимость K от c_p . Для системы Ge-Si эта зависимость неизвестна. На рис. 1 представлен график зависимости коэффициента сегрегации кремния K от c_p , построенный на основе диаграммы состояния системы германий-кремний по значениям концентраций кремния в сопряженных твердой и жидкой фазах [6]. Как видно из рис. 1 зависимость K от c_p носит сложный характер и в зависимости от концентрации кремния величина K изменяется от 5,5 до 1.

Решить интеграл в уравнении (5), в данном случае, можно графическим методом [6]. Взяв несколько значений c_p и соответствующих значений K , начиная с момента кристаллизации

расплава исходного состава до момента времени t , строится графическая зависимость $1/c_p$ ($K-1$) от c_p . Интеграл в уравнении (5) численно равен площади под кривой лежащей между ординатами c_p^0 и c_p . Вычислив графически величину интеграла для нужных значений c_p из уравнения (5) определяем γ . Поскольку каждому значению c_p соответствует определенное значение $c_k = c_p K$, то можно построить график распределения кремния в слитке, выражая длину в долях закристаллизованного расплава γ .

На рис. 2 представлены рассчитанные таким способом, зависимости распределения кремния по слиткам, полученным методом Бриджмена из пяти различных по составу исходных расплавов германий-кремний. Кривые 1, 2, 3, 4, 5 отвечают исходным значениям концентрации кремния в расплаве равным 75; 50; 52; 10 и 5 ат.%, соответственно. Как видно во всех случаях концентрация кремния вдоль слиткам уменьшается и в конце его стремится к нулю. Скорость изменения состава вдоль слитка зависит от концентрации кремния в исходном расплаве. Как видно из кривой 1 рис.2 при $c_p^0 = 75$ ат. % Si относительное изменение концентрации кремния $A = [(c_p^0 - c_p)/c_p^0] \cdot 100\%$ в начальной участке слитка достаточно мало (c_p^0 и c_p - концентрации кремния в начальной и конечной частях выбранного участка). Так, например, концентрации кремния в слитке при $\gamma = 0$ и 0,1 составляют 92,3 и 91,8 ат.%, что даст для A значение менее одного процента. Для случая с малым содержанием кремния в исходном расплаве ($c_p^0 = 5$ ат.%) (кривая 5) относительный коэффициент изменения кон-

центрации кремния на этом же участке составляет $A \approx 26\%$. Такое большое различие в A для рассмотренных случаев объясняется существенным ростом коэффициента сегрегации кремния в системе Ge-Si с уменьшением его концентрации в расплаве (см. рис. 1).

Анализ хода семейства кривых рис.2 дает возможность определять нужные режимы получения кристаллов системы Ge-Si с требуемым составом и градиентом концентраций компонентов при использовании метода Бриджмена. На скорость изменения состава вдоль слитка можно также повлиять путем использования ампул с изменяющимся поперечным сечением. Очевидно, что при этом геометрические размеры этих ампул будут рассчитываться на основе закономерностей изменения кривых рис. 2.

Следует отметить, что для многих практических целей требуются кристаллы твердых растворов с однородным распределением компонентов. Толщина таких кристаллов (d) обычно не превышает 1 мм. Нетрудно показать, что при длине слитков системы твердых растворов Ge-Si, полученных методом Бриджмена, около 100 мм, шайбы с $d \approx 1$ мм, вырезанные из определенных участков таких слитков, в направлениях параллельных фронту кристаллизации, будут практически однородными. На основе данных семейства кривых рис. 2 можно определить оптимальную исходную концентрацию расплава, необходимую для получения образцов Ge-Si нужного состава и с требуемой степенью однородности распределения компонентов в матрице.

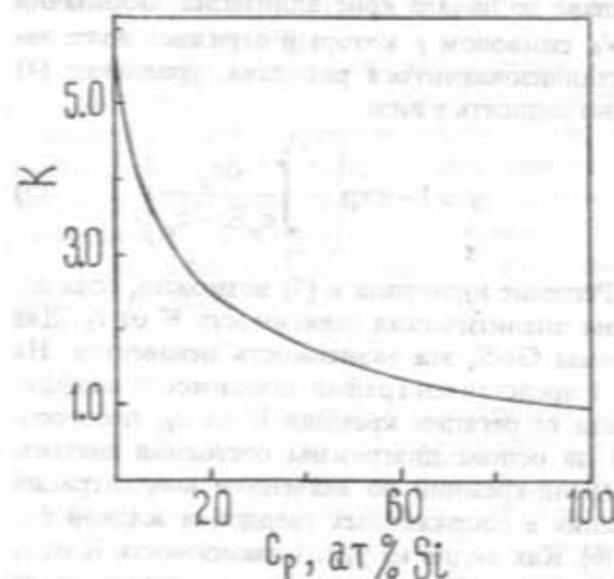


Рис. 1. Зависимость коэффициента сегрегации кремния (K) в системе Ge-Si от состава расплава (c_p), рассчитанная по данным [6].

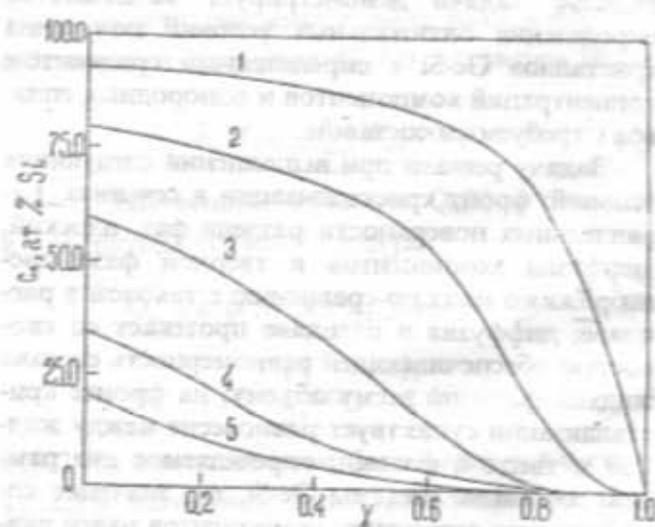


Рис. 2. Зависимость концентрации кремния (c_p) в слитках Ge-Si, выращенных методом Бриджмена, от γ . Кривые 1, 2, 3, 4 и 5 отвечает исходным значениям концентрации кремния в расплаве равным 75, 50, 25, 10 и 5 ат.%, соответственно.

1. Г.Х.Аждаров, В.И.Тагиров. Изв. АН СССР, Неорганические материалы, 1975, т.11, № 6, с. 981-984.
2. Г.Х.Аждаров, А.А.Мусав, А.С.Ганисв, М.Г.Шахтактинский. Изв. АН СССР, Неорганические материалы, 1980, т.16, № 7, с. 1155-1158.
3. Н.А.Агаев, В.В.Мир-Багиров, Г.Х.Аждаров. Изв. АН СССР, Неорганические материалы, 1989, т.25, № 7, с. 1131-1134.
4. Г.Х.Аждаров, Р.З.Кязимзаде, В.В.Мир-Багиров. Электронная техника, сер. материалы, 1991, № 7 (261), с. 57-60.
5. В.Н.Романенко, Г.В.Никитина, А.Г.Орлов. Изв. АН СССР, Неорганические материалы, 1970, т.6, № 7, с. 1215-1218.
6. В.М.Глазов, В.С.Земсков, В кн. "Физико-химические основы легирования полупроводников", Москва, "Наука", 1967, с.371.

P.G.AZH DAROV, N.A.AGAYEV

COMPONENTS DISTRIBUTION IN GERMANIUM-SILICON SOLID SOLUTIONS GROWING BY BRIDGEMAN METHOD

An expression for components distribution in Germanium-Silicon solid solutions crystals growing by Bridgeman method is derived. Dependence of the second component (Si) distribution coefficient from the melt composition is also taken into account. Distribution dependencies of Si along Ge-Si ingots growing from different compositions of melts are calculated. For determination of optimum conditions for Ge-Si crystals preparation with different compositions the results are discussed.

P.H.ƏJDƏROV, N.A.AĞAYEV

BRİCMEN ÜSULU İLƏ ALINAN GERMANIUM-SİLİSIUM BƏRK MƏHLULLARINDA KOMPONENTLƏRİN PAYLANMASI

Bricmen üsulu ilə alınan Germanium-Silisium bərk məsulları kristallarında komponentlərin paylanma məsələsi həll edilib. İkinci komponentin (Si) paylanma əmsalının ərintinin tərkibindən asılılığı nəzərə alınıb.

Ge-Si sistemində ərintinin müxtəlif tərkiblərindən alınan kristallarda silisiumun paylanması hesablanıb. Müxtəlif tərkibli Ge-Si kristalları alınması üçün optimal şəraitin müəyyən edilməsi baxımından alınmış nəticələr analiz edilib.

Дата поступления: 10.06.97.

Редактор: Б.Г.Тагив.