

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КОМПОНЕНТОВ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ТВЁРДЫХ РАСТВОРОВ GaSb-InSb, ВЫРАЩЕННЫХ МЕТОДОМ БРИДЖМЕНА

**Г.Х. АЖДАРОВ, З.М. ЗАХРАБЕКОВА, М.А. АКПЕРОВ,
А.И. АЛЕКПЕРОВ, В.В. МИР-БАГИРОВ**

Институт Физики им. академика Г.М.Абдуллаева

НАН Азербайджана

AZ- 1143, Баку, пр. Г.Джавида 33

Ənənəvi Brijmen üsulu ilə alınan GaSb-InSb bərk məhlul kristallarında komponentlərin paylanmasının Pfann yaxınlaşmasında riyazi modelləşdirilməsi aparılıb. Ərintinin müxtəlif başlanğıq tərkiblərindən alınan kristallarda GaSb komponentinin konsentrasiyon paylanması hesablanıb. Göstərilib ki alınan nəticələr müxtəlif tərkibi GaSb-InSb kristallarının alınmasında Bridjmen üsulunun imkanlarını və onun optimal şəraitlərini təyin edir.

В пфанновском приближении выполнено математическое моделирование распределения компонентов в кристаллах твёрдых растворов системы GaSb-InSb, выращенных традиционным методом Бриджмена. Рассчитаны зависимости распределения концентрации GaSb вдоль слитков, выращенных из расплава GaSb-InSb с различным стартовым составом. Полученные результаты определяют возможности метода Бриджмена и оптимальные условия для выращивания кристаллов GaSb-InSb различного состава из расплава.

A mathematical modeling of the components distribution in GaSb-InSb solid solutions crystals grown by the conventional Bridgman method has been carried out in Pfann approximation. GaSb concentration profiles along the ingots grown from the melt with various starting composition are calculated. Obtained results define the potential of the Bridgman method and optimum conditions for growing compositionally graded GaSb-InSb crystals from the melt.

Одним из перспективных материалов в ряду полупроводниковых алмазоподобных твёрдых растворов является квазибинарная система GaSb-InSb. Составные компоненты этой системы полностью растворяются друг в друге в любых соотношениях, как в жидком, так и в твёрдом состояниях [1]. Существенное различие в ширинах запрещённых зон GaSb (~0,80 эВ) и InSb (~0,23 эВ) открывает возможность прецизионного управления величиной этого фундаментального параметра в кристаллах GaSb-InSb путём простого изменения состава матрицы.

В настоящей работе проведено математическое моделирование распределения компонентов в монокристаллах твёрдых растворов GaSb-InSb, выращенных методом Бриджмена из расплава с различным исходным составом. Цель- установление оптимальных операционных параметров для выращивания кристаллов с заданным составом и распределением компонентов. Заметим, что аналогичные задачи были решены ранее для классической системы кремний – германий в пфанновском приближении [2-9]. Результаты этих работ дали хорошее согласие с экспериментальными данными для кристаллов, выращенных из расплава как консервативными, так и неконсервативными методами.

Задачу концентрационного распределения компонентов по длине кристаллов GaSb-InSb решали в пфанновском приближении, требующем выполнения следующих условий: скорости диффузии молекул GaSb и InSb в расплаве достаточно высоки и обеспечивают равномерность его состава по всему объёму; диффузия компонентов в твёрдой фазе пренебрежимо мала; в расплаве отсутствует испарение и разложение компонентов; фронт кристаллизации плоский; на фронте кристаллизации существует равновесие между жидкой и твёрдой фазами, определяемое диаграммой фазового состояния системы GaSb-InSb.

Введём следующие обозначения: V_0, V_1 – объёмы расплава в тигле в начальный и текущий моменты; V_c – объём

расплава, кристаллизующийся в единицу времени; C_0, C_1 – доля молекул GaSb в единице объёма кристалла и расплава соответственно; C_1^0 – концентрация (доля молекул) GaSb в расплаве в стартовой позиции кристаллизации; C – общее количество GaSb в расплаве.

Учитывая принятые обозначения, имеем

$$C_1 = C/V_1 \quad \text{и} \quad \frac{dC_1}{dt} = \frac{\dot{C}V_1 - \dot{V}_1 C}{V_1^2} \quad (1)$$

По условию задачи считаем, что V_c не зависит от времени, тогда имеем

$$V_1 = V_0 - V_c t, \quad \dot{V}_1 = -V_c, \quad \dot{C} = -V_c C_1 k \quad (2)$$

Подставляя данные (2) в уравнение (1) и, проведя интегрирование, получим

$$\frac{V_c t}{V_0} = \frac{l}{L_0} = 1 - \exp \left[- \int_{C_1}^{C_1^0} \frac{dC_1}{C_1 k - C_1} \right] \quad (3)$$

Здесь l – длина кристалла от стартовой позиции кристаллизации; L_0 – высота расплава до начала кристаллизации.

Для решения интеграла в уравнении (3) необходимо знание аналитической зависимости коэффициента сегрегации GaSb k от C_1 . На рис.1 представлена зависимости k от C_1 , рассчитанная по данным диаграммы состояния системы GaSb-InSb [1]. Как видно из этого рисунка параметр k изменяется сложным образом с составом расплава в довольно широком диапазоне от значения ~10,5

до 1 и не поддаётся аналитическому описанию. Однако, данные рис. 1 оказываются достаточными для определения значения интеграла в (3) графическим или численным методом. Взяв несколько значений C_1 и соответствующих им k , начиная с момента кристаллизации расплава до момента времени t , строят график зависимости $1/[C_1(k-1)]$ от C_1 . Интеграл в (3) численно равен площади под кривой, лежащей между ординатами C_1^0 и C_1 . Определив графически нужные величины C_1 , находим соответствующие l . Поскольку каждому значению состава расплава соответствует сопряжённое значение $C_c=C_1k$ можно построить график зависимости концентрационного распределения компонентов по длине кристалла.

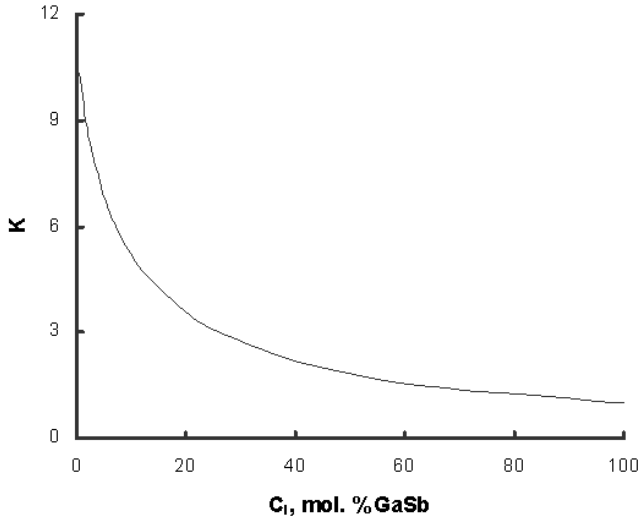


Рис.1. Зависимость коэффициента сегрегации GaSb (k) от состава расплава GaSb-InSb, рассчитанная по данным диаграммы фазового состояния системы [1].

На рис.2 приведены расчётные зависимости концентрации GaSb вдоль слитков твёрдых растворов GaSb-InSb, выращенных из расплава с четырьмя различными значениями стартового состава. Как видно, во всех случаях концентрация GaSb максимальна в начальной части слитка и уменьшается по его длине, стремясь к нулю в конце слитка. Концентрация GaSb в начальной части кристалла значительно превышает C_1^0 в связи с довольно большим значением коэффициента сегрегации этого компонента (см. рис.1). Скорость уменьшения концен-

трации GaSb вдоль слитка для каждого случая зависит от величины C_1^0 . Семейство кривых на рис.2 даёт возможность определять нужные режимы получения кристаллов системы GaSb-InSb с требуемым составом и градиентом концентраций компонентов. Как следует из анализа этих данных, при заданном количестве исходного расплава на скорость изменения состава вдоль кристаллов можно повлиять путём изменения диаметра растущих кристаллов. Заметим, что во многих случаях требуются кристаллы твёрдых растворов с однородным распределением компонентов. Как видно из рис.2 традиционный метод Бриджмена не обеспечивает выращивание таких кристаллов для системы GaSb-InSb. Для выращивания однородных кристаллов твёрдых растворов требуется применение неконсервативных методов, обеспечивающих постоянство состава расплава в процессе его кристаллизации [2,3].

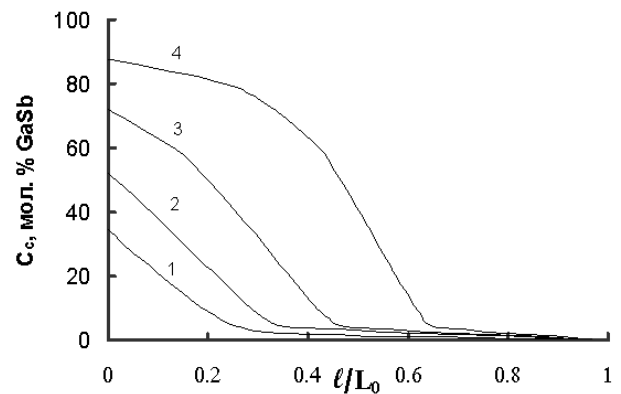


Рис.2. Зависимости концентрации GaSb в кристаллах твёрдых растворов GaSb-InSb, выращенных методом Бриджмена, от доли закристаллизовавшегося расплава (кривые 1, 2, 3 и 4 отвечают значениям концентрации GaSb в расплаве 5, 10, 20 и 40 мол.% соответственно).

На основе вышеизложенного материала можно сделать следующее заключение. Математическое моделирование распределения компонентов в кристаллах твёрдых растворов GaSb-InSb определяет возможности и оптимальные условия для получения материала с заданным составом и градиентом концентраций компонентов.

- [1]. S.C. Tsaur, S. Kou: J. Crystal Growth, 249, 2003, 470. [5]. З.М.Захрабекова, З.М.Зейналов, В.К.Кязимова, G.Kh.Azhdarov, T. Kucukomeroglu, A. Varilci et. al.: J. Crystal Growth, 226, 2001, 437. [6]. V.K.Kyazimova, Z.M. Zeynalov, Z.M.Zakhrabekova, , G.Kh .Azhdarov: Crystallography Reports, 1, 2006, №1, 192. [3]. N.V.Abrosimov, S.N.Rossolenko, W Thieme. et. al.: J. Crystal Growth, 174. 1997, 182. [7]. T.A.Campbell, M.Schweizer, P. Dold et. al.: J. Crystal Growth, 226, 2001, 231. [4]. П.Г.Аждаров, Н.А Агаев.: Неорганические материалы, 35, 1999, №8, 763.