

УДК 537.311.33; 54-165

**РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КОМПОНЕНТОВ В ТВЁРДЫХ РАСТВОРАХ InSb-InAs
ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ ИЗ РАСПЛАВА МЕТОДОМ ЧОХРАЛЬСКОГО**

Г.Х.АЖДАРОВ, Э.С.ГУСЕЙНОВА, М.А.АКПЕРОВ

*Институт физики АН Азербайджана
370143, г.Баку, пр. Г.Джавида, 33*

Решена задача распределения компонентов в кристаллах твёрдых растворов системы InSb-InAs, выращенных методом Чохральского, с учётом зависимости коэффициента сегрегации компонентов от состава расплава. Рассчитаны концентрационные зависимости InAs вдоль слитков, выращенных из расплавов InSb-InAs различного состава. Полученные результаты определяют оптимальные условия для выращивания кристаллов InSb-InAs с заданным распределением компонентов.

Одним из перспективных материалов в ряду полупроводниковых твёрдых растворов является система InSb-InAs, составные компоненты которой полностью растворяются друг в друге при любых соотношениях как в жидком, так и в твёрдом состояниях. Наиболее эффективным для выращивания массивных кристаллов твёрдых растворов является метод Чохральского [1-3]. В работах [3-4] решены вопросы распределения компонентов в твёрдых растворах системы Ge-Si при выращивании из расплава, результаты которых демонстрируют хорошее согласие с экспериментальными данными. В настоящей работе проведено математическое моделирование распределения компонентов вдоль оси кристаллизации в слитках InSb-InAs при выращивании методом Чохральского, с целью определения оптимальных операционных параметров и условий для изготовления кристаллов этой системы с заданным составом.

Задачу решали с учётом выполнения следующих стандартных условий [5]: фронт кристаллизации плоский; в процессе роста кристалла в расплаве не происходит разложение и испарение составных компонентов; диффузия InSb и InAs в твёрдой фазе пренебрежимо мала по сравнению с таковой в расплаве; диффузия компонентов в жидкой фазе протекает достаточно быстро и обеспечивается равномерность её состава по всему объёму; на фронте кристаллизации существует равновесие между жидкой и твёрдой фазами, определяемое диаграммой состояния системы. Очевидно, что выполнение многих из этих условий требует достаточно малых скоростей кристаллизации расплава.

Ниже приняты следующие обозначения: V_0 и V_p – объёмы расплава в начальный и текущий моменты; V_k – объём расплава кристаллизующийся в единицу времени; C_k и C_p – концентрация молекул второго компонента (InAs) в кристалле и расплаве соответственно; C – общее количество InAs в расплаве; $K=C_k/C_p$ – равновесный коэффициент сегрегации InAs; t – время.

По условию задачи считаем, что скорость кристаллизации расплава в течении всего технологического цикла остаётся постоянным ($dV_k/dt=0$) и тогда

$$V_p = V_0 - V_k t, \quad \dot{V}_p = -V_k, \quad \dot{C} = -V_k C_k = -V_k C_p K \quad (1)$$

Учитывая, что $C_p=C/V_p$ имеем

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

Подставляя в (2) данные (1) и, после разделения переменных и интегрирования, находим

$$\int_{C_p^0}^{C_p} \frac{dC_p}{C_p - C_p K} = \ln \frac{V_0}{V_0 - V_k t} = \ln \frac{1}{1 - \frac{V_k t}{V_0}} \quad (3)$$

Здесь C_p^0 - стартовая концентрация InAs в исходном расплаве. Обозначив долю закристаллизовавшегося расплава $V_k t / V_0$ символом γ , уравнение (3) запишем в следующем виде

$$\gamma = 1 - \exp \left[- \int_{C_p^0}^{C_p} \frac{dC_p}{C_p K - C_p} \right] \quad (4)$$

Решение интеграла в (4) требует знания аналитической зависимости K от C_p . Для системы InSb-InAs эта зависимость носит сложный характер и не поддается математическому описанию. На Рис.1 представлена зависимость равновесного коэффициента сегрегации InAs от состава расплава InSb-InAs, построенная по данным диаграммы состояния этой системы в сопряженных твердой и жидкой фазах. [6].

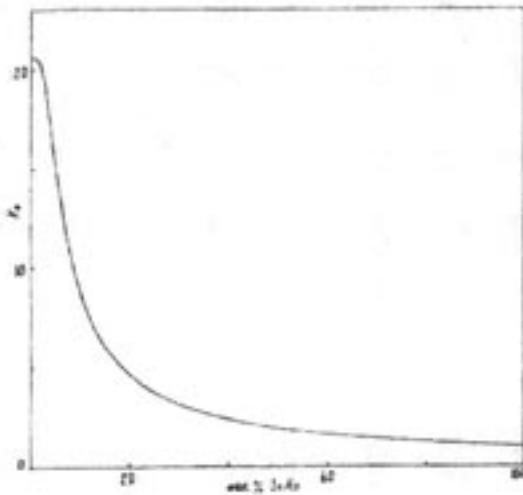


Рис.1

Зависимость равновесного коэффициента сегрегации InAs (K_0) от состава расплава, рассчитанная из диаграммы состояния системы InSb-InAs [6].

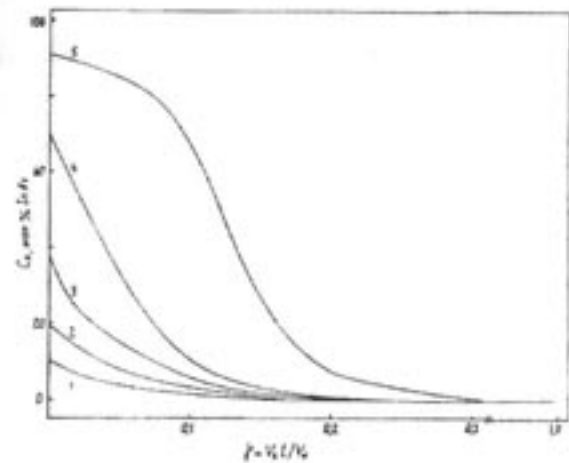


Рис.2

Зависимости концентрации InAs в кристаллах InSb-InAs, выращенных методом Чохральского, от доли закристаллизовавшегося расплава (кривые 1, 2, 3, 4, 5 отвечают стартовым концентрациям InAs в расплаве 0.5, 1, 2, 4, 12 мол % соответственно).

Как видно из Рис.1 K зависит от C_p сложным образом и изменяется в довольно широких пределах от ~ 20.5 до 1. Интеграл в (4), в данном случае, можно вычислить численным методом [3,5]. Взяв несколько значений C_p и сопряженных им K , начиная с момента кристаллизации стартового состава и до момента времени t , строится графическая зависимость $1/C_p K - C_p$ от C_p . Значение интеграла в (4) численно равно площади под кривой, лежащей между ординатами C_p^0 и C_p . Определив величину интеграла для ряда значений C_p , соответствующих различным моментам времени, находим соответствующие доли закристаллизовавшегося расплава - γ . Так как каждому значению C_p соответствует равновесное значение $C_k = C_p K$, то можно вычислить распределение второго компонента (InAs) по длине слитка в долях γ . Рис.2 демонстрирует, рассчитанные таким образом, зависимости состава кристаллов InSb-InAs вдоль оси кристаллизации при выращивании методом Чохральского для нескольких

стартовых композиций расплава. Как видно из Рис.2, во всех случаях концентрация InAs максимальна в начальной части кристалла и стремится к нулю в его конце. При этом величина C_k и скорость её изменения вдоль оси кристаллизации зависят от C_p^0 . Достаточно большое значение K при малых C_p^0 даёт возможность при стартовом составе расплава с содержанием InAs всего 12мол.% (кривая 5) получить кристалл с концентрацией этого компонента от ~96мол.% в начальном участке до ~0 в его конце. При этом существенный градиент концентрации достигается в начальном участке слитка от $\gamma=0$ до $\gamma=0.2$. Очевидно, что такой характер изменения состава кристалла делает эту систему перспективной для создания на их основе высокочувствительных варизонных приёмников инфракрасного излучения. Анализ хода кривых Рис.2 показывает, что скоростью изменения C_p вдоль слитков можно управлять также путём вариации поперечного сечения кристалла в процессе выращивания. Таким образом, семейство расчётных кривых C_k от γ , часть которых представлена на примере кривых Рис.2, позволяет определять необходимые режимы и технологические параметры для выращивания кристаллов системы InSb-InAs с требуемым составом и градиентом концентраций.

Резюмируя вышеприведённые данные и результаты, можно сделать следующее заключение. Теоретический анализ распределения компонентов в кристаллах InSb-InAs, выращенных методом Чохральского, проведённый с учётом изменения коэффициента сегрегации компонентов с составом расплава, позволяет произвести оценку оптимальных технологических параметров, таких как исходный состав расплава и поперечное сечение кристалла, с целью получения твёрдых растворов с заданным продольным распределением компонентов.

1. I. Yonenaga, *J. Crystal Growth*, **198/199** (1999) 404.
2. N.V.Abroshimov, S.N.Rossolenko, W.Thieme, A.Gerhardt, W.Schoeder, *J. Crystal Growth*, **174** (1997) 182.
3. П.Г.Аждаров, Н.А.Агаев, *Неорганические материалы*, **35** (1999) 903.
4. Н.А.Агаев, В.В.Мир-Багиров, Г.Х.Аждаров, *Неорганические материалы*, **25** (1989) 1131.
5. В.М.Глазов, В.С.Земсков, *В кн. Физико-химические основы легирования полупроводников. Москва, «Наука», (1967) 371.*
6. G.B. Stringfellow, P.E.Greene, *J. Electrochem. Soc.*, **118** (1971) 805.

ÇOXRALSKİ ÜSULU İLƏ ALINAN InSb-InAs BƏRK MƏHLULLARINDA
KOMPONENTLƏRİN PAYLANMASI
H.X. ƏJDƏROV, E.S. HÜSEYNOVA, M.Ə. ƏKBƏROV

Çoxralski üsulu ilə alınan InSb-InAs sisteminin bərk məhlulları kristallarında komponentlərin paylanma məsələsi həll edilib. Komponentlərin paylanma əmsalinin ərintinin tərkibindən asılılığı nəzərə alınib. InSb-InAs ərintisinin müxtəlif tərkiblərindən alınan kristallarda InAs komponentinin kristal boyunca paylanması hesablanıb. Alınan nəticələr InSb-InAs kristallarında verilmiş komponent paylanması əldə etmək üçün optimal şərtləri müəyyən edir.

COMPONENTS DISTRIBUTION in InSb-InAs SOLID SOLUTIONS GROWN by the
CZOCHELSKI TECHNIQUE
G.KH. AZHDAROV, E.S. GUSEINOVA, M.A. AKPEROV

A problem of components distribution in InSb-InAs crystals grown by the Czochralski technique is solved with consideration for the dependence of the components segregation coefficient on melt composition. The longitudinal InAs profiles were calculated for various initial melt composition. The obtained results can establish optimum conditions for growing InSb-InAs crystals of the desired components profiles.