

УДК 621.315

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ВЫРАЩИВАНИЯ НИТЕВИДНЫХ КРИСТАЛЛОВ

**КЕРИМОВ М.К., АББАСОВ Ш.М., АББАСОВ Ш.И.,  
ИБРАГИМОВА Р.А., БАЙЦАР Р.И.**

*Институт Радиационных Проблем НАН Азербайджана  
Институт Кибернетики НАН Азербайджана  
Львовский Политехнический Институт, Украина*

Среди существующих методов получения сплавов Ge-Si [1-3] в виде нитевидных кристаллов (НК) важное место занимает метод химических транспортных реакций (ХТР). Существенным его преимуществом является техническая простота, обеспечение роста химически стойких и структурно совершенных кристаллов с заданными параметрами, которые используются в различных полупроводниковых сенсорах [4-5]. В таком многофакторном технологическом процессе свойства кристаллов определяются температурами зон растворения и кристаллизации, количеством и типом легирующей примеси и транспортирующего агента, геометрией реакционной ампулы и др.

Оценить влияние технологических факторов на свойства НК можно путем применения методов математического моделирования, что позволяет определить оптимальное значение функции, которая характеризует исследуемый процесс. Планирование эксперимента значительно повышает его точность, уменьшает объем исследования и обеспечивает достижение технико-экономического эффекта без существенных капитальных вложений.

В данной работе установлена аналитическая зависимость удельного сопротивления ( $\rho$ ) и коэффициента тензочувствительности ( $K$ ) НК Ge-Si от концентрации легирующей примеси борного ангидрида ( $n_{B_2O_3}$ ) и мольного содержания Si ( $X_{Si}$ ) при концентрации транспортирующего агента (Br) 2,2 мг/см<sup>3</sup> и  $\Delta T = 300^\circ C$ .

### Методика эксперимента.

Для установления зависимости  $\rho = f(X_{Ge}, n_{B_2O_3})$  использовались результаты 4-х экспериментов по выращиванию НК Ge-Si в закрытой Ge-Si-Br системе при изменении мольного содержания в сплаве от 1 до 5 % и концентрации  $B_2O_3$  от  $4,03 \cdot 10^{-3}$  до  $6,05 \cdot 10^{-3}$  мг/см<sup>3</sup>. Полученные данные позволили установить область эксперимента для физических ( $X_{Si}$ ,  $n_{B_2O_3}$ ) и кодовых ( $x_i$ ) факторов. Кодовые  $x_i$  и  $X_i$  физические переменные связаны между собой следующим соотношением:

$$x_i = \frac{X_i - X_{i0}}{I_i} \quad (1)$$

где:  $I_i$  - интервал варьирования;  $X_{i0}$  - физическое значение основного уровня;  $X_i$  - нижний или верхний уровень физической переменной.

Все кодовые факторы безразмерные и нормированные величины. В процессе эксперимента они принимают значения -1, 0, +1.

Используя опытные данные, представляем план эксперимента в виде матрицы (Таблица 1). Математическая модель описывается уравнением вида:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_1x_2 \quad (2)$$

Последний член уравнения учитывает нелинейность зависимости. Таким образом, для каждого конкретного эксперимента получаем уравнение регрессии, в котором  $X_i$  и

$X_2$  кодовые величины, отвечающие соответственно  $X_{Si}$  и  $n_{B_2O_3}$  искомое неизвестное  $y$  - величинам  $\rho$  или  $K$ .

Согласно выбранной модели (2) и выполненному эксперименту, имеем 4 уравнения с 4 неизвестными, а именно  $b_0, b_1, b_2, b_3$ .

### Результаты эксперимента

Таблица 1, которая представляет матрицу двухфакторного эксперимента, составлена на основе результатов 4 опытов по выращиванию НК Ge-Si в закрытой галоидной системе.

В соответствии с (2) каждому номеру эксперимента отвечает уравнение:

$$\begin{aligned} \rho_1 &= b_0 + b_1 x_1^I + b_2 x_2^I + b_3 x_1^I x_2^I \\ \rho_2 &= b_0 + b_1 x_1^{II} + b_2 x_2^{II} + b_3 x_1^{II} x_2^{II} \\ \rho_3 &= b_0 + b_1 x_1^{III} + b_2 x_2^{III} + b_3 x_1^{III} x_2^{III} \\ \rho_4 &= b_0 + b_1 x_1^{IV} + b_2 x_2^{IV} + b_3 x_1^{IV} x_2^{IV} \end{aligned} \quad (3)$$

Исходя из теории планирования матрицы эксперимента [7,8], с учетом ее свойств, коэффициенты регрессии находят из следующих выражений:

$$\begin{aligned} b_0 &= \frac{\rho_1 + \rho_2 + \rho_3 + \rho_4}{4} \\ b_1 &= \frac{\rho_1 + \rho_2 - \rho_3 - \rho_4}{4} \\ b_2 &= \frac{\rho_1 - \rho_2 + \rho_3 - \rho_4}{4} \\ b_3 &= \frac{\rho_1 - \rho_2 - \rho_3 + \rho_4}{4} \end{aligned} \quad (4)$$

Таблица 1. Матрица эксперимента по влиянию мольного содержания германия в сплаве Ge-Si и концентрации борного ангидрида на электрофизические свойства НК Ge-Si.

Уровни факторов	$x_1$ ( $X_{Si}$ , мольный состав)	$x_2$ , ( $n_{B_2O_3}$ , мг/см <sup>3</sup> )
Основной уровень	0,03	$5,039 \cdot 10^{-3}$
Интервал варьирования	0,02	$1,009 \cdot 10^{-3}$
Нижний уровень	0,01	$4,030 \cdot 10^{-3}$
Верхний уровень	0,05	$6,048 \cdot 10^{-3}$

№	Уровни переменных		Отклик			
	$x_1$	$x_2$	$X_{Si}$	$n_{B_2O_3}$ , мг/см <sup>3</sup>	$\rho$ , Ом·см	$K = \frac{\Delta R}{R_0 \cdot \varepsilon}$
1	1	1	0,05	$6,048 \cdot 10^{-3}$	0,01070	105,37
2	1	-1	0,05	$4,030 \cdot 10^{-3}$	0,01228	108,19
3	-1	1	0,01	$6,048 \cdot 10^{-3}$	0,00513	103,76
4	-1	-1	0,01	$4,030 \cdot 10^{-3}$	0,1619	120,08

Подставляя значение  $\rho$ , полученные в каждом эксперименте, определяем коэффициенты регрессии:

$$\begin{aligned} b_0 &= 1,1075 \cdot 10^{-2} \\ b_1 &= 4,15 \cdot 10^{-4} \\ b_2 &= -3,16 \cdot 10^{-3} \end{aligned}$$

$$b_3 = 2,37 \cdot 10^{-3}$$

Таким образом, линейное уравнение регрессии для кодовых коэффициентов  $x_1$  и  $x_2$  в избранной области эксперимента принимают вид:

$$\rho = 1,1075 \cdot 10^{-2} + 4,15 \cdot 10^{-4} x_1 - 3,16 \cdot 10^{-3} x_2 + 2,37 \cdot 10^{-3} x_1 x_2 \quad (5)$$

Аналогичные соображения позволили получить зависимость коэффициента тензочувствительности НК Ge-Si как функции от состава сплава и концентрации легирующей компоненты через кодовые величины:

$$K = 109,3495 - 2,5705 x_1 - 4,7855 x_2 + 3,3745 x_1 x_2 \quad (6)$$

Для получения линейного уравнения регрессии, выраженного через реальные физические величины  $X_{Si}$  и  $n_{B_2O_3}$ , необходимо выполнить простые вычисления в уравнении:

$$y = b_0 + b_1 \frac{X_{Si} - X_{i0}}{\Delta I_{Si}} + b_2 \frac{n_{B_2O_3} - n_{i0}}{\Delta I_{B_2O_3}} + \left( \frac{X_{Si} - X_{i0}}{\Delta I_{Si}} \right) \cdot \left( \frac{n_{B_2O_3} - n_{i0}}{\Delta I_{B_2O_3}} \right)$$

Это дает возможность определить новые коэффициенты в уравнении регрессии для  $\rho$  и  $K$ , значения которых приведены в таблицах 2 и 3.

Таблица 2. Значения коэффициентов регрессии в уравнении для определения удельного сопротивления

$$\left( \rho = b_0^I + b_1^I X_{Si} + b_2^I n_{B_2O_3} + b_3 X_{Si} n_{B_2O_3} \right)$$

$b_0^I$	$b_1^I$	$b_2^I$	$b_3^I$
$4,39876 \cdot 10^{-2}$	$-5,7104 \cdot 10^{-1}$	-6,655	117,443

Таблица 3. Значения коэффициентов регрессии в уравнении для определения коэффициента тензочувствительности

$$\left( K = b_0^{II} + b_1^{II} X_{Si} + b_2^{II} n_{B_2O_3} + b_3 X_{Si} n_{B_2O_3} \right)$$

$b_0^{II}$	$b_1^{II}$	$b_2^{II}$	$b_3^{II}$
162,3829	-971,1466	-9759,415	167220

### Выводы

Путем моделирования технологического процесса получены аналитические зависимости, которые применены при выращивании НК с заданными электрофизическими параметрами. Это позволило значительно уменьшить количество экспериментов в исследуемой области роста НК, обеспечить экономию материалов и энергоносителей.

Зависимость:

$$\rho = 4,39876 \cdot 10^{-2} - 5,7104 \cdot 10^{-1} X_{Si} - 6,655 n_{B_2O_3} + 117,443 X_{Si} n_{B_2O_3}$$

дает возможность оценить электропроводность НК Ge-Si для определенного состава сплава при данной концентрации легирующей компоненты.

Коэффициент тензочувствительности в пределах составов 1÷5 мольных % кремния в НК Ge-Si при концентрациях легирующей компоненты ангидрида бора  $4 \cdot 10^{-3} \div 6 \cdot 10^{-3}$  мг/см<sup>3</sup> можно определить из зависимости:

$$K = 162,3829 - 971,1466 X_{Si} - 9759,42 n_{B_2O_3} + 167220 X_{Si} n_{B_2O_3}$$

Предлагаемая методика позволяет определить и другие параметры НК, которые важны при использовании кристаллов как чувствительных элементов сенсоров.

1. Борзяк П.И., Гиваргизов Е.И., Кулешова Г.И., Лифшиц И.Е., Степанова А.Н. Яценко Я.Ф., Изв. АН СССР, Сер. физ., 1976, т. 40, с.1571.
2. Сандулова А.В., Богоявленский П.С., Дронюк М.И., ДАН СССР, 1963, т.153, № 2, с.380.

3. *Байцар Р.І., Варшава С.С., Островська А.С.,* Тез. Доп. IV Міжнар. конф. з фізики і технології в тонких плінок, Івано-Франківськ, 1993, с.259.
4. *Новиков А.А., Байцар Р.И., Решетило А.П.,* ПСУ, 1980, №3, с.15.
5. *Байцар Р.И., Красноженов Е.П., Дмитрук Ю.В., Шилейкис Ю.С.,* ПСУ, 1982, № 10, с.18.
6. *Аббасов Ш.М., Агавердиева Г.И., Байцар Р.И.,* Тез. Док. VIII коорд. Совещания по исследованию и применению сплавов Si-Ge, Ташкент, "ФАН", 1991, с.79.
7. *Кринецкий И.И.,* Основы научных исследований, Киев, "Вища школа", 1981, 207 с.
8. *Аббасов Ш.М., Аббасов Ш.И., Климовская А.И., Байцар Р.И., Островский П.И.* Изв.НАН Азерб. Респб., г. Баку. Изд. «Элм». 2000. т.20. №2. С.117-122.

### **SAP ŞƏKİLLİ KRİSTALININ ALINMIASI TEXNOLOGİYASININ RİYAZİ MODELLƏŞMƏ METODU İLƏ YERİNƏ YETİRİLMƏSİ**

**KƏRİMOV M.K., ABBASOV Ş.M., ABBASOV Ş.İ.,  
İBRAHİMOVA R.A., BAYSAR R.İ.**

Sap şəkilli kristalların alınması metodlarından ən müasiri və keyfiyyətli kimyəvi transport reaksiyası ilə alınma metodudur. Bu metodun üstünlüyü riyazi modelləşmə metodu ilə kristalın alınması zamanı vaxta və itkiyə sərfin azalmasıdır.

### **THE REALIZATION OF THE TECHNOLOGY OF FILAMENTARY CRYSTAL'S GENERATION BY THE MATHEMATICAL MODELLING METHOD**

**KERIMOV M.K., ABBASOV Sh.M., ABBASOV Sh.I.,  
IBRAHIMOVA R.A., BAYSAR R.I.**

The modernest and the most efficient method of  $Ge_{1-x}Si_x$  filamentary crystal's generation is the chemical transport reaction. The superiority of this method is to save time and reducing of loss during the crystal's generation by the mathematical modeling method.