

**МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПОЗИЦИОННОГО ПРОФИЛЯ КРИСТАЛЛОВ
InSb-InAs, ВЫРАЩЕННЫХ МЕТОДОМ ДВОЙНОЙ ПОДПИТКИ
РАСПЛАВА**

П.Г.АЖДАРОВ, С.М.БАГИРОВА, В.В.МИР-БАГИРОВ

*Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, Баку, пр. Г.Джавида, 33*

В пфанновском приближении определены композиционные профили кристаллов InSb-InAs, выращенных модифицированным методом Чохральского в условиях непрерывной подпитки расплава слитками составных компонентов. Показана возможность получения монокристаллов с заданным переменным или однородным составами вдоль оси кристаллизации путём изменения соотношения скоростей кристаллизации и подпитки расплава.

Алмазоподобные полупроводниковые соединения InSb и InAs полностью растворяются друг в друге как в жидком, так и в твёрдом состояниях [1]. Образование непрерывного ряда твёрдых растворов между этими материалами позволяет получить кристаллы с шириной запрещённой зоны и значениями параметров кристаллической решётки, лежащими в интервале между соответствующими значениями составных компонентов матрицы. Возможность управления фундаментальными параметрами кристалла и его электронными свойствами путём изменения состава материала определяет актуальность работ, направленных на получение твёрдых растворов с заданным распределением компонентов в матрице.

Известно, что для выращивания наиболее качественных объёмных монокристаллов полупроводниковых материалов используется метод Чохральского. В работе [2] представлены результаты исследований по распределению компонентов в кристаллах InSb-InAs, выращенных по этому методу. Показано, что применение стандартного метода Чохральского для выращивания кристаллов твёрдых растворов InSb-InAs приводит к существенному градиенту концентрации второго компонента (InAs) вдоль оси кристаллизации. Такой характер композиционного профиля кристаллов связан со значительной сегрегацией компонентов и вытекает из диаграммы фазовых состояний системы [1]. В настоящей работе проведено моделирование распределения компонентов в кристаллах InSb-InAs, выращенных модернизированным методом Чохральского, включающим двойную подпитку расплава слитками составных компонентов системы. Цель работы - определение оптимальных операционных технологических параметров для выращивания кристаллов InSb-InAs с заданным однородным или переменным составами.

В основу математического моделирования распределения компонентов в кристаллах InSb-InAs, выращенных методом двойной подпитки расплава, заложена следующая технологическая схема. С момента роста кристалла из расплава InSb в него вводятся стержни из InSb и InAs. В течение всего технологического цикла скорости роста кристалла и подпитывания расплава поддерживаются постоянными. При решении задачи задавалось выполнение следующих стандартных условий [2]: на фронте кристаллизации существует равновесие между твёрдой и жидкой фазами, определяемое диаграммой состояния, конвекционные потоки и скорости диффузии молекул составных компонентов в расплаве достаточно велики и обеспечивают равномерность его состава по всему объёму, диффузия компонентов в растущем кристалле пренебрежимо мала, в расплаве отсутствует испарение и

разложение компонентов. Отметим, что решение аналогичных задач в указанных условиях в системах Si-Ge [3] и GaSb-InSb [4] даёт хорошее согласие с экспериментом.

В работе [5] в пфанновском приближении получена следующая зависимость концентрации второго компонента C_{2c} вдоль оси кристаллизации при выращивании кристалла методом двойной подпитки расплава:

$$C_{2c} = \frac{K}{K-1+\alpha+\beta} \left\{ \alpha - \left[\alpha - (K-1+\alpha+\beta)C_{2m}^0 \right] \times \left[1 - (1-\alpha-\beta)\gamma \right]^{\frac{K-1+\alpha+\beta}{1-\alpha-\beta}} \right\}, \quad (1)$$

здесь $K=C_{2c}/C_{2m}$ - коэффициент сегрегации второго компонента, C_{2c} и C_{2m} - концентрации второго компонента в кристалле и расплаве, соответственно, $\alpha = V_2/V_c$ - отношение объёма подпитывающего слитка второго компонента (V_2), вводимого в расплав в единицу времени к объёму расплава, кристаллизующегося в единицу времени, $\beta = V_1/V_c$ - отношение объёма подпитывающего слитка первого компонента (V_1), вводимого в расплав в единицу времени к объёму расплава кристаллизующегося в единицу времени, $\gamma = V_{ct}/V_m^0$ - доля кристаллизованного расплава в единицах исходного объёма расплава, C_{2m}^0 - концентрация второго компонента в расплаве при $t=0$.

Для рассматриваемого нами случая исходная концентрация второго компонента (InAs) в расплаве $C_{2m}^0 = 0$. Отметим, что выбор этого варианта продиктован его наиболее частым использованием на практике [3,6]. В этом случае отпадает необходимость изготовления затравок с различной концентрацией компонентов, соответствующих составу исходного расплава. Для этого варианта из уравнения (1) имеем:

$$C_{2c} = \frac{K}{K-1+\alpha+\beta} \left\{ 1 - \left[1 - (1-\alpha-\beta)\gamma \right]^{\frac{K-1+\alpha+\beta}{1-\alpha-\beta}} \right\}. \quad (2)$$

Для частного случая, когда $\alpha+\beta=1$, объём расплава в тигле остаётся неизменным и равным исходному, и уравнение (2) преобразуется в следующее [5]:

$$C_{2c} = \alpha(1 - e^{-\gamma K}). \quad (3)$$

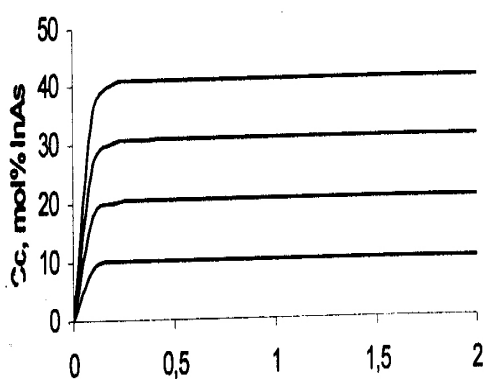


Рис.1.

Зависимости концентрации второго компонента-InAs от γ в кристаллах InSb-InAs, построенные на основании соотношения (2) при $\alpha+\beta=0,5$. Кривые 1,2,3 и 4 относятся к значениям $\alpha:\beta$ равным $1/4$, $2/3$, $3/2$ и $4/1$, соответственно.

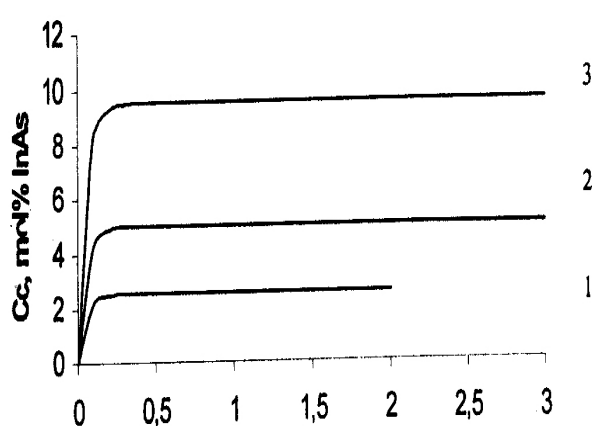


Рис.2.

Зависимости концентрации второго компонента - InAs от γ в кристаллах InSb-InAs, построенные на основании соотношений (2) (кривые 1, 3) и (3) (кривая 2) при $\alpha:\beta = 1:19$. Кривые 1,2 и 3 относятся к значениям $\alpha+\beta$ равным $0,5$; 1 и 2 соответственно.

На Рис.1 для примера приведены кривые зависимости второго компонента-InAs в кристалле InSb-InAs от γ для четырёх различных соотношений скоростей подпитывания расплава первым и вторым компонентами и постоянном значении $\alpha + \beta = 0.5$. Кривые рассчитаны из уравнения (2). В расчётах коэффициент разделения арсенида индия принят равным его равновесному значению ($K=20.5$), определяемому из фазовой диаграммы состояния системы [1]. Рис.2 демонстрирует эти же зависимости для трёх различных значений $\alpha + \beta$, равных 0.5, 1.0 и 2.0, рассчитанных из уравнений (2) и (3). Здесь принято, что $\alpha : \beta = 1 : 19$, что соответствует подпитке расплава слитком InSb-InAs с 5ат.%InAs. Если для $\alpha + \beta \geq 1$ (кривые 2 и 3 Рис.2) процесс роста кристалла может продолжаться неограниченно долго, то для $\alpha + \beta < 1$ (Рис.1 и Рис.2. кривая 1) он ограничен окончанием расплава в тигле. Этому соответствует обращение в ноль выражения в квадратных скобках в уравнении (2). Действительно, если при $t=t_{\max}$ член $[1 - (1 - \alpha - \beta)\gamma] = 0$, то объём расплава $V_m = V_m^0 - (V_c - V_{Ge} - V_{Si})t_{\max} = 0$. Практически, конечно, рост кристалла прекратится раньше, чем при $t=t_{\max}$. Анализ уравнений (1)-(3) и характер изменения хода кривых C_{2c} от γ , демонстрируемый на Рис.1 и Рис.2, показывают на возможность получения твёрдых растворов InSb-InAs с практически однородным составом и требуемой композицией. Кроме того, метод двойной подпитки может быть успешно применён также для получения монокристаллов с заданным градиентом концентраций компонентов. Очевидно, что целенаправленные расчёты, выполненные для различных значений $\alpha + \beta$ и $\alpha : \beta$, будут определять оптимальные операционные параметры для выращивания монокристаллов InSb-InAs с заданным распределением компонентов методом двойной подпитки расплава.

Выращивание монокристаллов системы InSb-InAs с применением подпитывающих слитков может быть успешно осуществлено на установке описанном в работе [6], которая обладает автоматической системой для поддержания заданного диаметра растущего кристалла и механизмом ввода подпитывающих слитков в расплав.

На основе вышеизложенного можно сделать следующее заключение: математическое моделирование в пфанновском приближении композиционного профиля кристаллов InSb-InAs, выращенных методом Чохральского с применением непрерывной подпитки расплава слитками составных компонентов, показывает возможность получения монокристаллов твёрдых растворов с заданным распределением компонентов, включая однородное; значения оптимальных технологических параметров $\alpha + \beta$ и $\alpha : \beta$ для выращивания кристаллов данной системы определяются моделированием распределения компонентов вдоль оси кристаллизации.

1. В.С. Земсков, *Твёрдые растворы в полупроводниковых системах*, М.: Наука, (1978) 197.
2. Г.Х.Аждаров, Э.С.Гусейнова, М.А.Акперов, *Transaction of Azerbaijan Academy of Sciences, Series of Physical-mathematical and Technical sciences, Physics and Astronomy*, **XX** №5 (2000) 11.
3. G.Kh.Azhdarov, T.Kucukomeroglu, A.Varilci, M.Altunbas, A.Kobyay, P.G.Azhdarov, *Journal of Crystal Growth*, **226** (2001) 437.
4. S.C.Tsaur, S.Kou, *Journal of Crystal Growth*, **249** (2002) 470.
5. G.Kh.Azhdarov, M.A.Akperov, V.V. Mir-Bagirov, *Fizika*, **9** №2 (2003) 43.

6. N.V. brosimov, S.N.Rossolenko, W.Thieme, A.Gerhardt, W.Schroeder, *Journal of Crystal Growth*, **174** (1997) 182.

**ƏRİNTİNİ İKİQAT QİDALANDIRILMA ÜSULU İLƏ ALINAN InSb-InAs KRİSTALLARININ
KOMPOZİSİYA PROFİLİNİN MODELƏŞDİRİLMƏSİ**

P.H. ƏCDƏROV, S.M. BAQİROVA, V.V. MİR-BAQİROV

InSb və InAs ilə fasiləsiz qidalanan ərintidən Çoxralski üsulu ilə alınan InSb-InAs kristallarının kompozisiya profili Pfann yaxınlaşmasında təyyin edilib. InSb-InAs monokristallarında verilmiş dəyişən və birjinsli komponent paylanması əldə etmək üçün ərintinin kristallaşdırma və qidalandırma sürətlərinin münasibətini dəyişmə ilə imkanı göstərilib.

**MODELING OF A COMPOSITIONAL PROFILE IN InSb-InAs CRYSTALS GROWN BY THE
DOUBLE FEEDING OF THE MELT METHOD**

P.G. AZHDAROV, S.M. BAGIROVA, V.V. MIR-BAGIROV

A compositional profile in InSb-InAs crystals grown by the modified Czochralski method using a continuous feeding of the melt with InSb and InAs rods has been solved in consideration of the Pfann approximation. A possibility in preparing InSb-InAs single crystals with desired uniform and compositionally graded profiles by variation of the crystallization and feeding rates of the melt is shown.

Редактор: Дж.Абдинов