

**ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИ
ПАРАМЕТРОВ ПАРОВ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ В
КВАЗИЗАМКНУТОМ ОБЪЁМЕ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ
МОНОКРИСТАЛЛОВ И СЛОЁВ ИЗ ПАРОГАЗОВОЙ ФАЗЫ**

**Н.Д.АХМЕДЗАДЕ¹, Т.С.МАМЕДОВ^{1,2}, А.А.ИСМАИЛОВ¹,
Ф.А.МИКАЙЛОВ^{1,3}, М.М.ШИРИНОВ¹**

Институт Физики НАН Азербайджана¹

AZ 1143, г.Баку, пр.Г.Джавида 33

Университет Гази²

Анкара, Турция

Институт высоких технологий³

Габза, Турция

Предлагаются упрощённая модель и методика для расчёта зависимости критического расстояния конденсации паров полупроводниковых материалов группы A_2B_6 от рода конденсированных элементов, а также температур испарения и конденсации. Решение на ЭВМ результирующего уравнения позволяет определить оптимальные размеры кварцевого реактора, температур испарения и конденсации, при этом прогнозируется распределение примесных элементов и чистого материала по длине сконденсированного слитка.

Полупроводниковые соединения группы A_2B_6 являются перспективными материалами для создания на их основе оптоэлектронных излучающих приборов, в том числе, в оптическом диапазоне [1]. К ним относятся цифрознаковые индикаторы, активные элементы твёрдотельных лазеров, приборы и средства отображения информации и т.д. Вполне естественно, что для эффективной работы этих приборов совершенно необходимо получение полупроводниковых материалов с высоким квантовым выходом, а это в свою очередь достигается за счёт получения высокочистых материалов совершенной структуры. Известно, что для проведения технологических процессов по выращиванию кристаллов высокого качества необходимы оптимизация и контроль одновременно нескольких параметров. Среди них немаловажная роль отведена газодинамическим параметрам, определяющим лимитацию процессов массопереноса. В работе предлагается методика расчёта газодинамических параметров паров соединений A_2B_6 в процессе их очистки методом последовательного испарения и конденсации [2], а также в процессах выращивания эпитаксиальных слоёв и монокристаллов из парогазовой фазы. В ранее опубликованной нами работе [3] были определены расчётным путём и подтверждены экспериментально температурные интервалы для получения конгруэнтно испаряющихся соединений A_2B_6 . Используя результаты из [3], и во избежание неоправданного увеличения объёма публикации, приведём пример расчёта для соединения CdS,ZnSe. Следует отметить, что также, как и в [3], все подходы и допущения справедливы и для других соединений конгруэнтно испаряющегося состава. Методика, а также математический аппарат для расчёта газодинамических параметров A_2B_6 заимствованы из работы [4]. Последовательность расчёта следующая. Задаваясь геометрическими размерами реактора (в форме кварцевой трубы), температурой испарения и градиентом температуры вдоль реактора, находим значения газодинамических параметров пара (давление, плотность, температуру и т.д.) в начальном газодинамическом сечении, рассчитываем положение критического сечения конденсации и профили всех газодинамических переменных в функции от безразмерной ординаты. В нашем случае диаметр реактора - D , длина - L . Температурные режимы (температура

источника и градиент) варьировались в процессе расчёта в широких пределах. Конструкцию нагревателя считаем такой, что градиент температуры вдоль стенок реактора подчиняется линейному закону и вычисляется по формуле

$$\frac{dT_c}{dX} = \frac{T_s - T_{подл}}{L}, \quad (1)$$

где T_s и $T_{подл}$ - температуры источника и подложки, соответственно.

1. Рассчитаем параметры в начальном газодинамическом сечении. Для двухатомного пара ZnSe $\left(\gamma = C_p/C_v = 7/5\right)$ $T_1 \cong 0,7T_s$; $\rho_1 \cong 0,33\rho_n(T_s)$. Здесь ρ_1 и T_1 являются плотностью частиц в единице объёма и температурой пара в начальном газодинамическом сечении. Плотность насыщенного пара найдём из уравнения состояния идеального газа

$$\rho_n(T) = m p_n(T_s) / RT_s, \quad (2)$$

где m – молекулярная масса ZnSe, P_n – давление насыщенного пара, R – универсальная газовая постоянная.

Для ZnSe P_n можно найти из уравнения

$$\lg P_n(T) = -\frac{12340}{T} + 6,725. \quad (3)$$

Определив ρ_1 и T_1 , найдём значения давления (P_1), расхода пара (G_1) скорости потока (U_1) в начальном газодинамическом сечении из следующих формул

$$P_1 = \frac{\rho_1 RT_1}{m}, \quad (4)$$

$$U_1 = \sqrt{\frac{\gamma RT_1}{m}}, \quad (5)$$

$$G = \rho_1 U_1 (\pi D^2 / 4). \quad (6)$$

2. Вычислим положение критического сечения конденсации. При линейном изменении температуры вдоль реактора положение критического сечения конденсации для двухатомного пара определяется формулой

$$X_{kp} = \frac{\left[T_s(1-\eta) + 1,3 \frac{T_s^2}{T^*} \right]}{\frac{dT_c}{dX}}, \quad (7)$$

где η -параметр индивидуальный для каждого материала, представляет собой отношение энергий испарения тонкой пленки и массивного материала. Для ZnSe, например, $\eta=0,961$, а CdS=0,983, CdSe=0,977, CdTe=0,968.

Значение T^* по (7) находится из соотношения $T_{kp} = T_s \left(1 - 1,08 \frac{T_s}{T^*} \right)$. Уравнение

движения пара с учётом расходного воздействия(конденсация и реиспарение)будет

$$\frac{dG}{G} = \left[\sqrt{\frac{RT}{2\pi m}} - \frac{\rho_n(T)}{\rho_1} \sqrt{\frac{RT_c}{2\pi m}} \right] \cdot \frac{4dx}{4d}. \quad (8)$$

3. Профили газодинамических переменных рассчитываются в безразмерном виде как функции от безразмерной координаты $\xi = \frac{X - X_{kp}}{L - X_{kp}}$. Нормирование параметров

пара производится по их значениям в начальном газодинамическом сечении или, что то же самое, по их значениям в критическом сечении конденсации. Все

газодинамические переменные однозначно выражаются через число Маха (M), равное отношению скорости потока газа в произвольном сечении к местной скорости звука a в том же сечении.

Запишем уравнение, связывающее число Маха (M) и безразмерную переменную ξ

$$\frac{dM}{d\xi} = \frac{aQ}{M^2 - 1} \left[1 - Q^v \exp\left(-\frac{b\xi}{1-c\xi}\right) \right], \quad (9)$$

Это уравнение решается только численно. Его решение было реализовано с помощью подпрограммы RKGS языка FORTRAN-4G. Задавая различные значения (от 0 до 1), вычисляем соответствующие им значения числа Маха. Это даёт возможность для вычисления коэффициента конденсации, нормированных значений плотности $\left(\frac{\rho}{\rho_1}\right)$, давления $\left(\frac{P}{P_1}\right)$, температуры $\left(\frac{T}{T_1}\right)$, расхода пара $\left(\frac{G}{G_1}\right)$, скорости потока пара $\left(\frac{U}{U_1}\right)$, скорости конденсации $\left(W^* = \frac{W}{W_1}\right)$.

По результатам вычислений составляются таблицы. Ввиду того, что табличные результаты займут достаточно много места в публикации, мы их не приводим, тем более, что интересующийся исследователь может вычислить любой из этих параметров, пользуясь предлагаемыми формулами, например, вычисленные значения расхода пара $G \cdot 10^{-3} \text{ кг} \cdot \text{с}^{-1}$ при $T_s = 700^\circ\text{C}$ и $T_c = 680^\circ\text{C}$ для соединений CdS, CdSe, CdTe соответственно равны $2,2 \cdot 10^{-2}$, $4,3 \cdot 10^{-2}$, $9 \cdot 10^{-2}$. От нас лишь добавим, что приведённая методика расчёта позволяет практически реализовывать получаемые результаты при выращивании монокристаллов и слоёв из парогазовой фазы. Скажем, если стоит задача получить конденсаты A_2B_6 более совершенной структуры, то подложку целесообразно помещать в такую зону камеры, где степень пресыщения паровой фазы относительно низка, скорость конденсации велика и конденсация идёт в условиях интенсивного реиспарения. Пользуясь этими соображениями, можно выбрать тот интервал изменения безразмерной координаты ξ , который бы лучше всего удовлетворял перечисленным выше требованиям при конкретных температурах источника T_s и подложек T_n , удовлетворяющих условиям из [3].

1. В. Н. Мартынов, Н. Д. Ахмед-заде, М. Б. Славин, А. Н. Соловьёв, С. П. Кобелева, *Электронная промышленность*, №6 (1982) 55.
2. В. Н. Мартынов, Н. Д. Ахмед-заде, М. Б. Славин, А. Н. Соловьёв, Способ получения легковозгоняющихся соединений A_2B_6 , Авторское свидетельство N1077342, Бюллетень изобретений и открытий №8 (1984).
3. Н. Д. Ахмед-заде, М. Ю. Сеидов, *Физика*, 5 №4 (1999) 44.
4. Ю. З. Бубнов, М. С. Лурье, Ф. Г. Старо-с, Г. А. Филаретов, Вакуумное нанесение плёнок в квазизамкнутом объеме, М. Сов. Радио, (1975) 161.

**KVAZIQAPALI HƏCMDƏ EPITAKSIAL TƏBƏQƏ VƏ BUXAR-QAZ FAZASINDAN
MONOKRISTALLAR YETİŞDIRİLMƏSİNDƏN ALINAN A_2B_6 YARIMKEÇİRİCİ
BİRLƏŞMƏLƏRİN BUXARLARININ QAZ DİNAMİKASININ PARAMETRLƏRİ VASİTƏSİLƏ
TERMODİNAMİK HESABLANMASI**

N.D.ƏHMƏDZADƏ, T.S.MƏMMƏDOV, A.A.İSMAYILOV, F.A.MİKAYILOV, M.M.ŞİRİNOV

İşdə riyazi aparat və gaz dinamikasının qanunlarından istifadə edərək transportun, buxarlanmanın, və kondensasiyanın asanlaşdırılmış modeli və kondensasiya olunmuş elementlər sırasından A_2B_6 yarımkeçirici materiallarının kondensasiya olan buxarlarının böhran məsafəsinin riyazi asılılığının hesablanması metodu verilmişdir (elementlərin kütlələri, atom və ya molekulların ölçüləri, buxarlanma və kondensasiya temperaturu). EHM-də yekun tənliyin həlli kvarts reaktorunun optimal ölçülərini, buxarlanma və kondensasiya temperaturunu təyin etməyə imkan verir, həmçinin aşqar elementlərin və təmiz materialların kondensiyalanmış külçə boyunca paylanması barədə məlumat verir.

**THERMODYNAMIC CALCULATION OF GAS DYNAMICS PARAMETERS OF
SEMICONDUCTOR A_2B_6 GROUP IN QUASI-CLOSED VOLUME FOR SINGLE CRYSTALS
AND EPITAXIEN LAYERS GROWTH**

N.D.ACHMED-ZADE, T.S.MAMMADOV, A.A.ISMAILOV, F.A.MIKAILOV, M.M.SHIRINOV

Suggested simple models evaporation, transport and condensation and method for calculations of dependence critic length of steam condensation of semiconductor materials A_2B_6 dependent of kind of condensations elements (elements mass, size of molecules or atoms, temperature evaporations and condensations) by using mathematical approach and the gas dynamics rules. Decision by computer final equation produced optimal size of quartz reactions and evaporation temperature and condensation temperature and at the same time make prognosis of distribute of admixture elements and poor material by length of condensation ingot.

Редактор: М.Алиев