

ОПТИМАЛЬНЫЕ ОПЕРАЦИОННЫЕ ПАРАМЕТРЫ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ СОЕДИНЕНИЙ ТИПА А^{III}-В^V С ЗАДАНЫМ КОНЦЕНТРАЦИОННЫМ ПРОФИЛЕМ МЕТОДОМ ЗОННОЙ ПЛАВКИ.

З.М. ЗАХРАБЕКОВА, А.И. АЛЕКПЕРОВ, В.К. КЯЗИМОВА, Г.Х. АЖДАРОВ

Институт Физики НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан

zangi@physics.ab.az

В пфаннывском приближении решена задача концентрационного распределения компонентов вдоль кристаллов твёрдых растворов соединений типа А^{III}-В^V, выращенных методом зонной плавки. С учётом сложного изменения коэффициента сегрегации второго компонента с составом расплава, рассчитан ряд аксиальных концентрационных профилей компонентов в кристаллах этого типа. Показана возможность управления в широких пределах концентрационным распределением компонентов в рассматриваемых кристаллах путём изменения длины расплавленной зоны. Анализ полученных результатов определяет оптимальные технологические параметры для выращивания кристаллов твёрдых растворов соединений типа А^{III}-В^V с заданным однородным и переменным составами вдоль матрицы.

Key words: монокристалл, твёрдые растворы, пфаннывское приближение, расплавленная зона

PACS: 63.20.dk 74.25.Kc

Одной из основных задач технологии выращивания объёмных монокристаллов полупроводниковых твёрдых растворов из расплава является получение материала с заданным аксиальным концентрационным профилем компонентов, а также обеспечение его монокристалличности. В широком ряду полупроводниковых твёрдых растворов особого интереса заслуживают монокристаллы твердых растворов полупроводниковых соединений типа АIII-BV [1]. Кристаллы этой системы широко используются в современной технике.

В настоящей работе, в пфаннывском приближении, решена математическая задача по определению распределения компонентов вдоль монокристаллов твёрдых растворов полупроводниковых соединений типа АIII-BV, выращенных методом зонной плавки. Цель – установление возможностей метода зонной плавки для выращивания монокристаллов твёрдых растворов полупроводниковых соединений типа АIII-BV с заданным переменным и постоянным составами.

Задачу концентрационного распределения компонентов вдоль кристаллов полупроводниковых соединений типа АIII-BV, выращенных методом зонной плавки, решали в пфаннывском приближении.

Математические расчеты, проведенные в этом приближении, приводят к интегральным выражениям, дающим возможность определить изменение концентрации второго компонента вдоль длины полученного путем кристаллизации слитка.

На участке от $l=0$ до $l=L-Z$ долевого состав компонентов по длине растущего кристалла определяется уравнением

$$\int_{C_m^0}^{C_m} \frac{dC_m}{C_i - C_m K} = \frac{V_c t}{V_m^0} = \frac{l}{Z} \quad (1)$$

где $K=C_c/C_m$ – коэффициент сегрегации второго компонента в кристалле; C_c , C_i , C_m – концентрационные доли второго компонента в кристалле, исходном поликристаллическом стержне и расплаве соответственно; V_c – объём расплава

кристаллизующийся в единицу времени; V_m^0 и C_m^0 – объём и концентрационная доля второго компонента расплава в начальный момент; Z – длина расплавленной зоны; L – общая длина исходного стержня.

Для конечного участка, с момента образования финальной расплавленной зоны длиной Z , имеем:

$$\gamma \equiv \frac{l^*}{Z} = 1 - \exp \left[- \int_{C_m}^{C_m^0} \frac{dC_m}{C_m K - C_m} \right] \quad (2)$$

Здесь C_m^0 – стартовая концентрационная доля атомов второго компонента в расплаве в момент образования конечной расплавленной зоны; l^* и γ – длина и кристаллизованная часть расплава конечной зоны ($V_c t / V_m^0$) в момент t соответственно.

Определение l/Z и γ , как функции C_m (равно как и $C_c = K C_m$) вдоль всей длины материала, подвергнутого зонной перекристаллизации, требует решения интегралов в уравнениях (1) и (2). Коэффициент сегрегации второго компонента (K), входящий в оба эти уравнения, довольно сложным образом зависит от C_m [1]. Это обстоятельство приводит к необходимости вычисления интегралов в (1) и (2) численным методом с использованием данных диаграммы равновесного фазового состояния получаемых систем.

На рис.1 для примера представлены характерные кривые концентрационного распределения GaAs по длине кристаллов твёрдых растворов InAs-GaAs, выращенных методом зонной плавки с использованием над затравкой заранее изготовленных стержней из InAs и поликристалла InAs-GaAs с заданным составом, рассчитанные из уравнений (1) и (2) и соотношения $C_c = K C_m$. Расчёты проведены для трёх различных значений C_i ($x=0.1$; 0.4 ; 0.7) исходного слитка InAs-GaAs при длине расплавленной зоны $Z=0.1 L$.

Как видно из рис.1, в начальной части всех кристаллов концентрация GaAs растёт по длине от нуля до соответствующего значения C_i исходного макроднородного слитка InAs-GaAs.

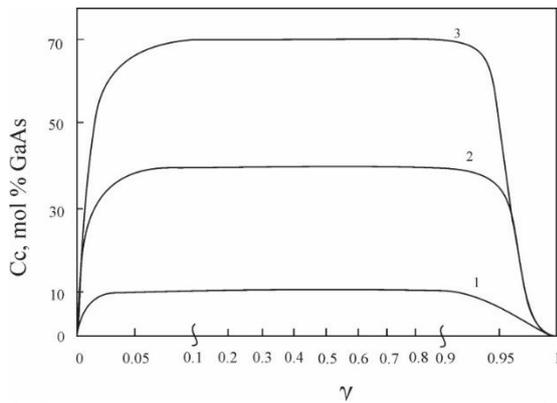


Рис.1. Расчётные аксиальные концентрационные профили GaAs в монокристаллах InAs-GaAs, выращенных модифицированным методом зонной плавки. Длина расплавленной зоны $Z=0.1L$. Состав исходных макрооднородных слитков InAs-GaAs: 1 – 10, 2 – 40, 3 – 70 ат.% GaAs.

Затем, по мере роста кристалла значение C_c остаётся неизменным вплоть до формирования финальной зоны длиной $Z=0.1L$. В этой части слитка концентрация GaAs начинает резко падать с ростом и стремится в конце к нулю.

На рис.2 представлены характерные кривые концентрационных профилей компонентов в кристаллах InSb-AlSb, выращенных методом зонной плавки с использованием над затравкой стержня из поликристалла InSb-AlSb для четырёх различных значений Z . При этом нагревателе проводится расплавление начальной части стержня над затравкой и по истечении стабилизационного времени включается механизм перемещения нагревателя вверх. В расчётах стартовый состав всех исходных макрооднородных слитков принят равным $In_{0.6}Al_{0.4}Sb$. Как видно из этого рисунка операционный параметр Z существенно влияет на перераспределение компонентов при зонной перекристаллизации исходного стержня InSb-AlSb заданного состава. При этом, длины как однородной, так и неоднородной по составу частей кристалла определяются шириной расплавленной зоны.

На рис.3 представлены характерные кривые концентрационного распределения GaSb вдоль кристаллов InSb-GaSb, выращенных с использованием над затравкой стержней из InSb и поликристалла InSb-GaSb для различных значений Z . В расчётах стартовый состав всех исходных макрооднородных стержней принят равным $InSb_{0.5}-GaSb_{0.5}$.

Как видно из этого рисунка в данном случае операционный параметр Z также существенно влияет на перераспределение компонентов при зонной перекристаллизации. Резюмируя вышеизложенное, можно констатировать следующее.

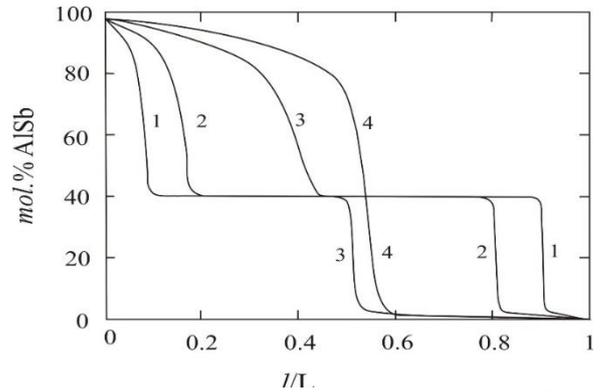


Рис.2. Аксиальное концентрационное распределение AlSb в монокристаллах InSb-AlSb, выращенных методом зонной плавки из исходного слитка $In_{0.6}Al_{0.4}Sb$. Длина зоны расплава: (1) – $Z=L/10$, (2) – $Z=L/5$, (3) – $Z=L/2$, (4) – $Z=L$. Длина исходного слитка – L .

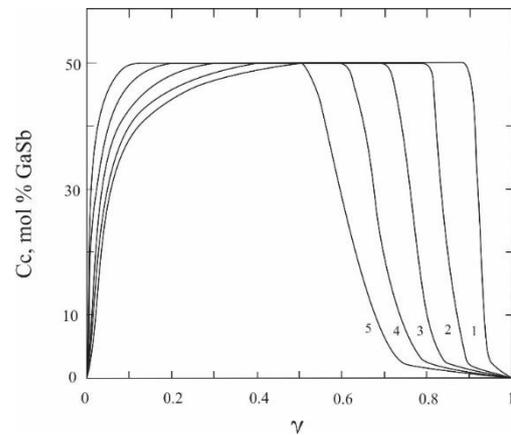


Рис.3. Расчётные концентрационные профили GaSb вдоль монокристаллов InSb-GaSb, выращенных модифицированным методом зонной плавки при различных значениях длины расплавленной зоны Z . Кривые 1,2,3,4,5 отвечают значениям $Z/L= 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ соответственно. Состав для всех исходных слитков твёрдых растворов принят равным $InAs_{0.5}-GaAs_{0.5}$.

Математическое моделирование аксиального распределения компонентов в монокристаллах твёрдых растворов полупроводниковых соединений типа $A^{III}-B^V$, выращенных методом зонной перекристаллизации, даёт возможность произвести оценку оптимальных технологических параметров (длина расплавленной зоны и исходный состав слитка) для получения кристаллов твёрдых растворов с заданным концентрационным профилем компонентов.

[1] В.С. Земсков, В.Б. Лазарев. Твёрдые растворы в полупроводниковых системах, «Наука», Москва, (1978)197.