

ТЕРМОДИНАМИЧЕН АНАЛИЗ НА ОТЛАГАНЕ НА ТРОЙНИ СЪЕДИНЕНИЯ ВЪРХУ ПОДЛОЖКА ОТ InP С ГАЗОВА ЕПИТАКСИЯ

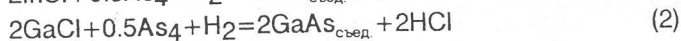
гл.ас.инж.Веселка Маринова Иванчева - ТУ-София,ИПФ-Сливен
Петър Белев -студент, спец.“Електроника и автоматика“,ИПФ-Сливен

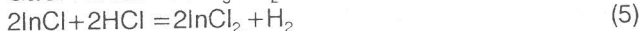
Introduction.

$In_{1-x}Ga_xAs$ alloys have received much attention as materials for laser and detector diodes in long-distance fiber-optical communication system. The alloys lattice-matched to InP substrates can be grown by vapor-phase epitaxy. For the preparation of these alloys, it is essential to know fundamentally the growth aspects of alloys from the vapor phase. The thermodynamic calculation provide a useful tool for prediction of the deposit composition. The purpose of this paper is to describe the detailed analysis of the $In_{1-x}Ga_xAs$ vapor growth.

В този доклад е предложен метод за анализ на отложения състав на трикомпонентната система от $In_{1-x}Ga_xAs$. Равновесните парциални налягания на газовите видове са изчислени като са взети в предвид “активностите“ на бинарните съединения в тройния състав. За да може да се извърши анализа на газовото израстване трябва да се вземат предвид следните десет газови видове: $In_{1-x}Ga_xAs$, $InCl$, $InCl_2$, $InCl_3$, $CaCl$, $CaCl_3$, As_4 , As_2 , HCl и носещия газ H_2 . В реакторната тръба има и Cl_2 , Cl , AsP , As_2P_2 , As_3P , AsP_3 и $CaCl_3$, но техните парциални налягания са малки и са пренебрегнати.

Химичните реакции, които съединяват всички видове в зоната на отлагане са [Л1]:





където,

$\text{GaAs}_{\text{съед}}$ и $\text{InAs}_{\text{съед}}$ са бинарните съединения в $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y$

Равновесните парциални налягания на газовите видове в зоната на отлагане могат да бъдат получени чрез решаването на следната система от уравнения:

$$K_1 = a_{\text{InAs}}^2 P_{\text{HCl}}^2 / P_{\text{InCl}}^2 P_{\text{As}_4}^{0.5} P_{\text{H}_2} \quad (7)$$

$$K_2 = a_{\text{GaAs}}^2 P_{\text{HCl}}^2 / P_{\text{GaCl}}^2 P_{\text{As}_4}^{0.5} P_{\text{H}_2} \quad (8)$$

$$K_3 = P_{\text{InCl}_3} P_{\text{HCl}} / P_{\text{InCl}} P_{\text{HCl}}^2 \quad (9)$$

$$K_4 = P_{\text{GaCl}_3} P_{\text{H}_2} / P_{\text{GaCl}} P_{\text{HCl}}^2 \quad (10)$$

$$K_5 = P_{\text{InCl}_2}^2 P_{\text{H}_2} / P_{\text{InCl}}^2 P_{\text{HCl}}^2 \quad (11)$$

$$K_6 = P_{\text{As}_2}^2 / P_{\text{As}_4} \quad (12)$$

$$P_{\text{GaCl}} + P_{\text{InCl}} + P_{\text{As}_4} + P_{\text{As}_2} + P_{\text{AsH}_3} + P_{\text{P}_4} + P_{\text{P}_2} + P_{\text{PH}_3} + P_{\text{HCl}} + P_{\text{H}_2} + P_{\text{инерт.газ}} = 1 \quad (13)$$

$$A = (P_{\text{InCl}} + 2P_{\text{InCl}_2} + 3P_{\text{InCl}_3} + P_{\text{GaCl}} + 3P_{\text{GaCl}_3} + P_{\text{HCl}}) (2P_{\text{H}_2} + P_{\text{HCl}})^{-1} \quad (14)$$

$$B = [(P_{\text{InCl}} + P_{\text{InCl}_2} + P_{\text{InCl}_3} + P_{\text{GaCl}} + P_{\text{GaCl}_3}) - (4P_{\text{As}_4} + 2P_{\text{As}_2})] \cdot (2P_{\text{H}_2} + P_{\text{HCl}})^{-1} \quad (15)$$

където:

a_{GaAs} и a_{InAs} са активностите на бинарните съединения;

A е отношението на сбора на хлорните атоми към броя на атомите на водорода и може да заема стойности от 10^{-1} до 10^{-4} [Л2];

B е отношението на броя на атомите от трета група минус броя на атомите от пета група, разделено на броя на атомите на водорода и инертния газ и е равен на 0, защото включените елементи от трета и пета група се отлагат в отношение 1:1;

Активностите на бинарните съединения се определят от следните уравнения:

$$a_{\text{InAs}}(T, x) = x \cdot e^{-\frac{a(1-x)^2}{RT}}$$

$$a_{\text{GaAs}}(T, x) = (1-x) \cdot e^{\frac{\alpha x^2}{RT}}$$

където:

α - итерактивен параметър (2000 cal/mol)

R - универсална газова константа (8,319 m³.Pa.mol⁻¹.K⁻¹)

T - температура в Келвини

x - моларна фракция на InAs в слоя

Равновесните константи K_i символизират температурни коефициенти - функции на една променлива от вида:

$$\lg K_i(T) = \text{const.} a_i \cdot \frac{1000}{T} + \text{const.} b_i$$

Системата от нелинейни уравнения (СНУ) може да се представи абстрактно като функция на четири аргумента, даваща девет стойности:

$$(x_1, x_2, \dots, x_9) = F(T, x, A, B)$$

т.с. за всеки четири фиксирани параметъра получаваме девет стойности. Ако фиксираме трите параметъра, а четвъртия го оставим променливи, СНУ може да се представи като функция на един аргумент, графичното изобразяване на която представлява девет линии в равнината. Ако фиксираме двата параметъра, СНУ се представя като девет повърхнини в пространството - тримерна графика.

Изчислителните процедури са извършени по алгоритъм с използването на програмен продукт MATLAB.

Фиг.1 показва зависимостта на 9 парциалните налягания на деветте видове при фиксирани стойности на температурата и параметрите A, x и B.

От графиките се вижда, че:

- с увеличаване на температурата, наляганията на H₂, InCl, CaCl, As₄, остават непроменени, докато наляганията на As₂ се увеличават, а на InCl₂, InCl₃, CaCl₃ намаляват.

- с увеличаване на A, парциалните налягания на всички видове се увеличават, с изключение на водорода, което намалява. Парциалните налягания на InCl₃ и GaCl₃ са много по малки в сравнение с тези на другите видове. Налягането на H₂ е приблизително равно на 1, т.с. сумата от парциалните налягания от всички останали видове е много по-малко от това на H. Налягането на InCl е почти 10 пъти по-голямо от това на GaCl.

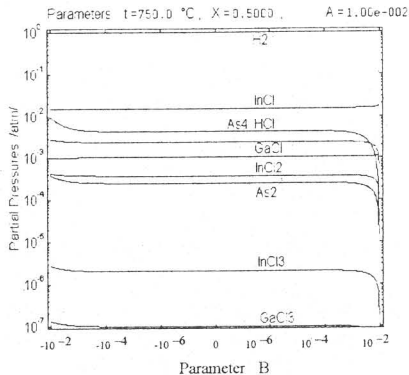
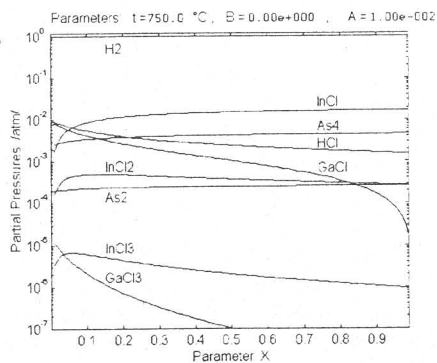
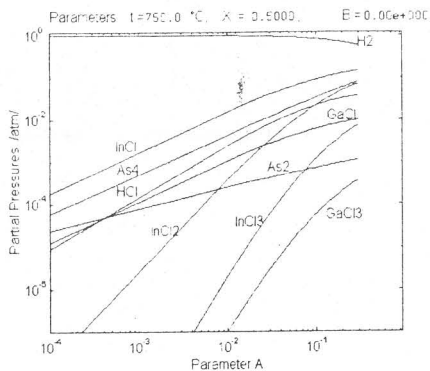
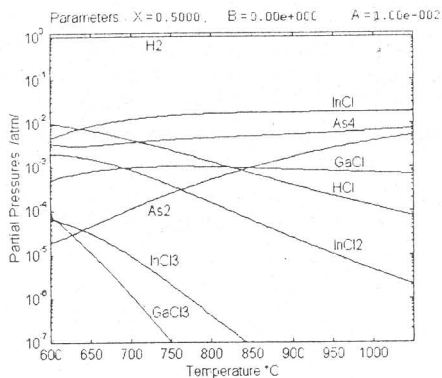
-отложените части In и Ga силно зависят от парциалните налягания на CaCl и GaCl₃ .(зависимост на парциалните налягания от параметъра x),

- с увеличаване на параметъра В парциалните налягания остават непроминени.

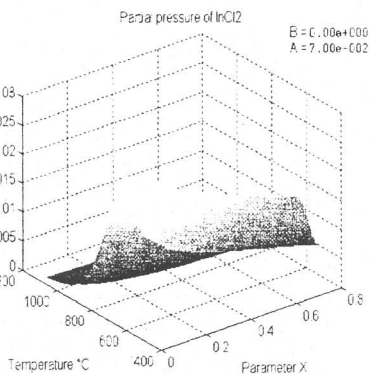
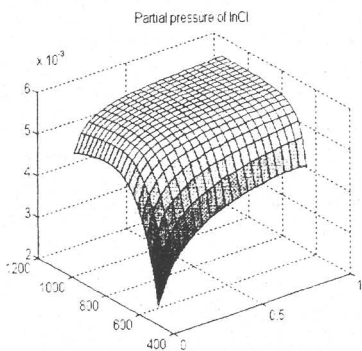
Поведението на системата може да бъде наблюдавано също и с помощтта на тримерни графики, където се вижда зависимостта на парциалните налягания от два параметъра. На фиг.2 са показани някои от тези зависимости.

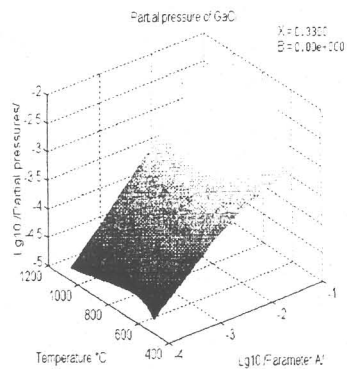
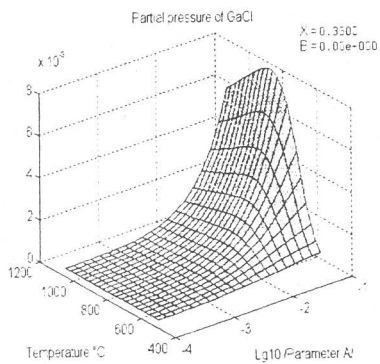
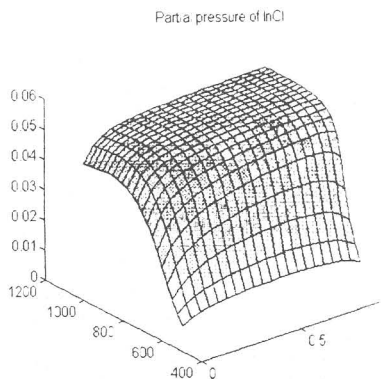
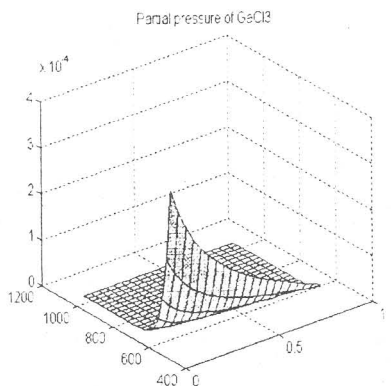
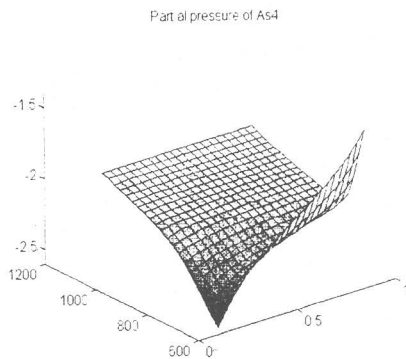
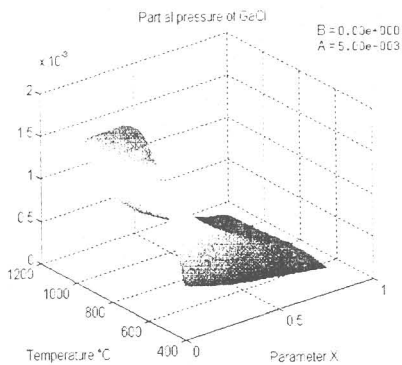
ЛИТЕРАТУРА

- 1.H.Seki, A. Koukito, Japan. J. Appl. Phys 13 (1989)
2. V.S.Ban, J.F.Gossenberger, J.J.Tietjen, J. Appl. Phys 33 (1989)
- 3.В.Потемкин, Москва 1998 г. "Matlab 5 для студентов".



фиг. 1.





фиг.2.