КОМПЮТЪРНО ПРОЕКТИРАНЕ НА ЕПИТАКСИАЛНОТО ИЗРАСТВАНЕ ОТ ГАЗОВА ФАЗА НА СЛОЕВЕ ОТ InGaP И InGaAs

инж.Веселка Маринова Йотова-Иванчева, инж.Петър Белев
ТУ-София, ИПФ-Сливен

EQUILIBRIUM COMPUTATION FOR THE VAPOR GROWT OF InGaP AND InGaAs ALLOYS. A computation method developed for the analysis of the equilibrium state of a multi- component system has been aplied to the In-Ga-As-Cl -H-inert gas and In-Ga-P-Cl -H-inert gas systems. The general features of the equilibrium partial pressures are found to be quite similar to those for the binary and ternary systems. The calculations can easily be carried out with a computer so that a large number of various combinations.

1. Въведение.

За създаването на сравнително евтини приемници и излъчватели с дължина на вълната 1,3-1,6mm най-често се използват епитаксиални слоеве от InGaAs и InGaP върху подложка от InP получени от газова фаза. Приготвянето на сместта, изборът на подходяща температура, контролът на отлагания състав, изследването на този състав е много важна и много сложна процедура. Технологично може да се подходи като се експериментира с произволно избрани взаимодействуващи си параметри и след натрупаните екпериментални опити да се търсят оптималните условия за отлагане на необходимите ни слоеве. Това е много трудоемък и скъпо струващ подход. Много добри резултати в предсказване на състава на отложения слой е използването на термодинамичен анализ. С негова помощ може да се предвиди какъв слой ще се отложи, като се отчетат факторите които влияят на епитаксиалния процес. Съставът на слоя е пряко свързан с наляганията на различните видовете газове в зоната на отлагане.

2. Изчислителна процедура.

Обектът на математическите изчисления при термодинамичният анализ, представлява система от девет нелинейни уравнения (СНУ). Това са равновесните уравнения записани, използувайки Законът за действие на масите, за химичните реакции протичащи при епитаксиалното израстване, :

Обобщени за слоеве от $In_xGa_{1-x}P$ и $In_xGa_{1-x}As$ те имат следния вид:

$$K_1(T) = \frac{a_1^2(T,x).x_1^2}{x_2^2.\sqrt{x_3}.x_7} \quad (1)$$

$$K_2(T) = \frac{a_2^2(T,x).x_1^2}{x_5^2.\sqrt{x_3}.x_7} \quad (2)$$

$$K_3(T) = \frac{x_8.x_7}{x_2.x_1^2} \quad (3)$$

$$K_4(T) = \frac{x_9.x_7}{x_5.x_1^2} \quad (4)$$

$$K_5(T) = \frac{x_6^2.x_7^2}{x_2^2.x_1^2} \quad (5)$$

$$K_6(T) = \frac{x_4^2}{x_3} \quad (6)$$

$$\sum_{i=1}^{9} x_i = 1 \quad (7)$$

$$A = \frac{x_2 + 2.x_6 + 3.x_8 + x_5 + 3.x_9 + x_1}{2.x_7 + x_1} \quad (8)$$

$$B = \frac{(x_2 + x_6 + x_8 + x_5 + x_9) - (4.x_3 + 2.x_4)}{2.x_7 + x_1} \quad (9)$$

Неизвестните за СНУ - x_1, x_2, . . . , x_9 символизират парциалните налягания на газовете, участвуващи в химичните реакции при епитаксиалното израстване.

Коефициентите a_1 и a_2 в уравнения (1) и (2) символизират активностите на бинарните съединения в слоя и представляват функции на две променливи.

Свободните членове $K_1(T)$, $K_2(T)$, . . . , $K_6(T)$ в уравнения от (1) до (6) символизират скоростни константи, които при равновесни процеси се наричат равновесни константи.

Свободните членове A и B представляват параметри, който са постаянни при дадени условия и улесняват цифровите изчисления.

Чрез комбинации от деление(можем да делим на нула, защото наляганията са различни от нула), умножени и събиране между уравнения от системата нелинейни уравнения получаваме следните изрази:

$$r_1 = x_4 \qquad (10)$$

$$r_2 = \frac{K_1.x_4}{a_1^2.\sqrt{K_6}} \qquad (11)$$

$$r_3 = \sqrt{\frac{K_1}{K_2}.\frac{a_2}{a}} \qquad (12)$$

$$r_4 = \frac{K_1.K_3.x_4}{a_1^2.\sqrt{K_6}} \qquad (13)$$

$$r_5 = \frac{K_2.K_4.x_4}{a_2^2.\sqrt{K_6}} \qquad (14)$$

$$r_6 = \sqrt{\frac{K_1.K_5.x_4}{\sqrt{K_6}}} \qquad (15)$$

$$r_7 = x_3 + x_4 = \frac{x_4^2}{K_6} + x_4 \qquad (16)$$

$$r_8 = 4x_3 + 2x_4 = \frac{4x_4^2}{K_6} + 2x_4 \qquad (17)$$

При фиксирани параметри на T, x, B, A и стартова стойност на x_4, изразите от (10) до (18) получават конкретни числови стойности и чрез изразяване в уравнения от (1) до (7) и уравнение (9), получаваме :

$$\frac{x_1^2}{x_2^2.x_7} = r_2 \qquad (18)$$

$$x_5 = r_3.x_2 \qquad (19)$$

$$x_8 = r_4.x_2^3 \qquad (20)$$

$$x_9 = r_5.r_3^3.x_2^2 \qquad (21)$$

$$x_6 = r_6.x_2^2 \qquad (22)$$

$$x_2 + x_6 + x_8 + x_5 + x_9 + x_1 + x_7 = 1 - r_7 \qquad (23)$$

$$B = \frac{(x_2 + x_6 + x_8 + x_5 + x_9) - r_8}{2.x_7 + x_1} \qquad (24)$$

От изразите от (19) до (22) директно определяме текущите стойности на x_5, x_8, x_9 и x_6 и ги заместваме в (23) и (24) :

$$(r_4 + r_3.r_5).x_2^3 + r_6.x_2^2 + (r_3 + 1).x_2 + x_1 + x_7 = 1 - r_7 \qquad (25)$$

$$B = \frac{(r_4 + r_3.r_5).x_2^3 + r_6.x_2^2 + (r_3 + 1).x_2 - r_8}{2.x_7 + 1} \qquad (26)$$

По този начин сведохме СНУ до система от три уравнения - (18), (25) и (26) с три неизвестни : x_1, x_2 и x_7. Ако B = 0 от (26) се получава кубично уравнение спрямо x_2.

Ако B е различно от 0, чрез изразявания от последната система получаваме :

$$b_1x_2^3 + b_2x_2^2 + b_3x_2 + b_4 + \sqrt{b_5x_2^5 + b_6x_2^4 + b_7x_2^2 + b_8x_2^2} = 0 \qquad (27)$$

къдетоb$_1$, b_2, ..., b_8 са нелинейни комбинации на r_1, r_2, ..., r_8 и B, вследствие заместването.

След пресмятането на x_2 от кубичното уравнение, ако B = 0 или от израз (27), ако B е различно от нула, изчисляваме x_1 и x_7 от уравнения (18), (25) и (26). Чрез уравнение(6) пресмятаме x_3.

Следващата стъпка е заместването на получените текущи стойности в неизползваното уравнение (8) и получаваме текущата изчислена стойност на параметъра A. Последната я сравняваме със зададената такава. В зависимост от получената разлика, променяме стартовата стойност на x_4 и пресмятаме системата нелинейни уравнения отново. Това продължава докато разликата между изчислената текуща стойност на A стане по-малка от зададената в алгоритъма точност.

Парциалните налягания заемат само реални и положителни стойности, от друга страна сумата от всички е равна на една атмосфера. Поради тези ограничения решенията x_1, x_2, ..., x_9 трябва да ги търсим в диапазона (нула - единица). За щастие системата нелинейни уравнения има само едно решение в посочения диапазон.

Блок - схемата на алгоритъма, коментиран по-горе за решение на СНУ е показана на фиг1 и фиг.2 .Актуализацията на стартовата стойност на x_4 се извършва по метода двоично търсене.

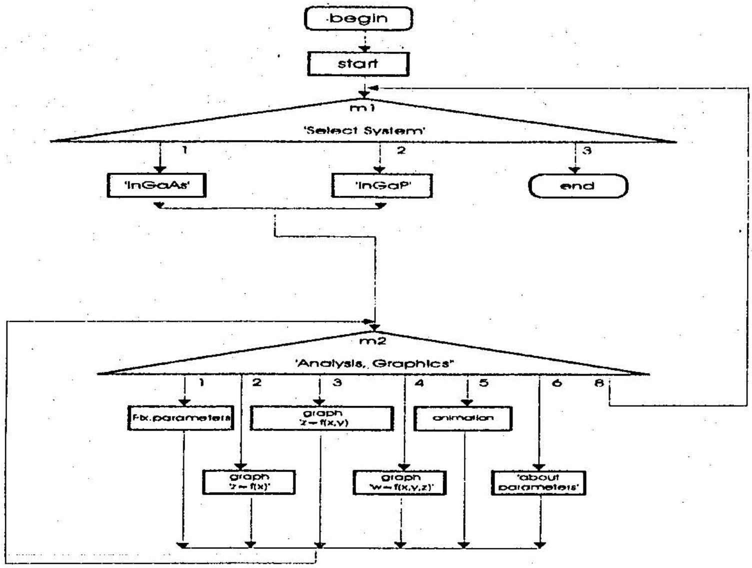
Програмното решение на разгледания проблем е реализирано на езика Matlab специализиран за математически изчисления и графично представяне на резултатите.

Крайните резултати от изчисленията са парциалните налягания, които могат да се представят в двумерни, тримерни и четиримерни графики, показани на фиг.3. Двумерната графика при програмата на MatLab дава възможност чрез бутони от менюто да се избере изобразяването на парциалното налягане на един от деветте газови видове, или на всички и представянето им да бъде логаритмичен или нормален вид. При тримерната графика се дава възможност да се проследи поведението на системата при изменящи се всеки два от параметрите. Освен това, ако променяме стъпково и трети параметър и извличаме отделните кадри, чрез самият MatLab или чрез специализиран за целта външен продукт може да се реализира анимация. Чрез меню се избират цветовите гами, вид на повърхнината, логаритмично или нормално представяне на резултатите.

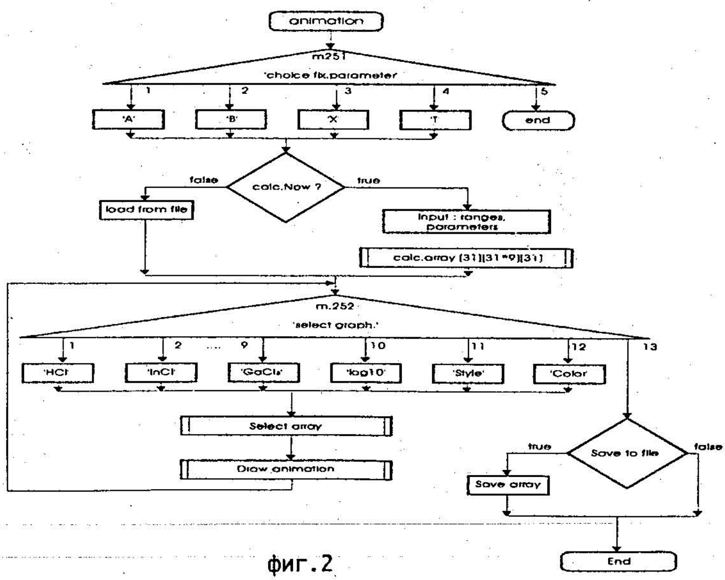
Литература

1. Таков Т., Иванчева В.-Термодинамичен анализ на отлагане на тройни съединения върху подложка от InP с газова епитаксия. сп. Е+Е, 2000 г.

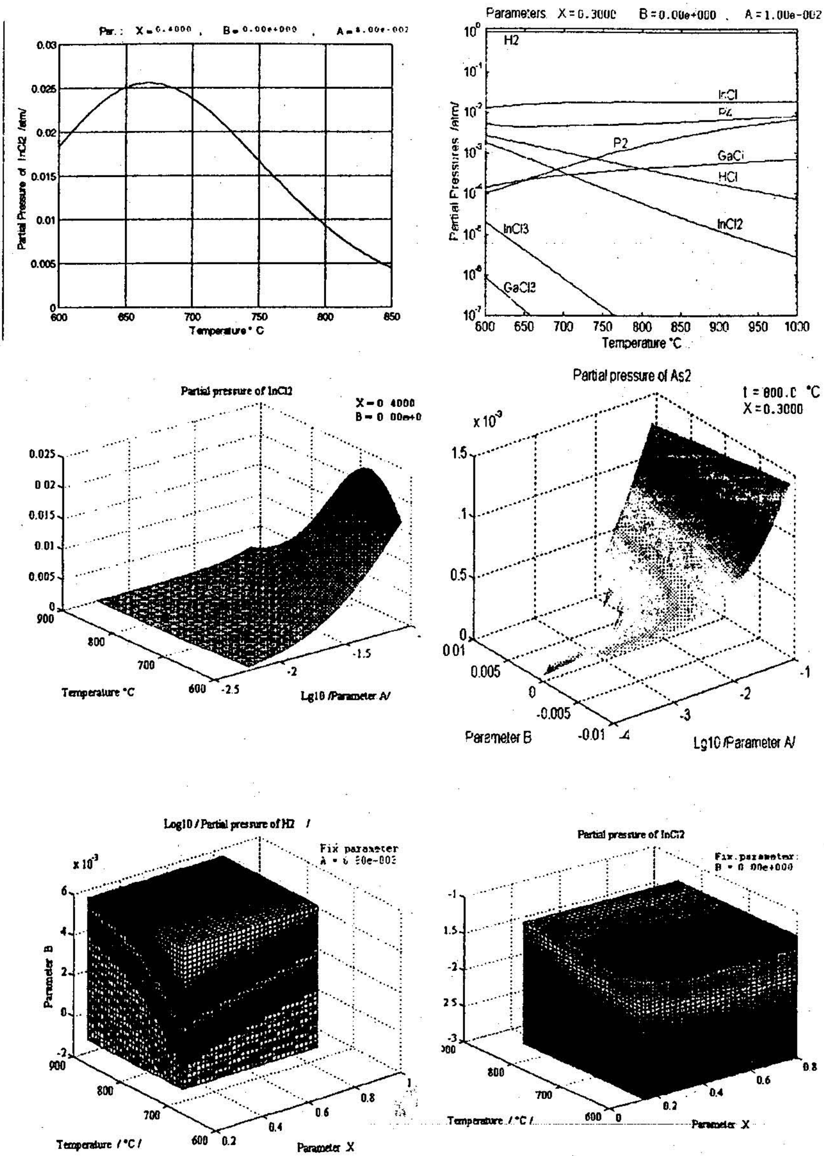
2. Потемкин В. MATLAB для студентов, Москва, 1998г.


begin
start
m1
'Select System'
1
2
3
'InGaAs'
'InGaP'
end
m2
'Analysis, Graphics"
1
2
3
4
5
6
8
Fix.parameters
graph 'z = f(x,y)
animation
graph 'z = f(x)'
graph 'w = f(x,y,z)'
'about parameters'

фиг.1


animation
m251
'choice fix.parameter
1
2
3
4
5
'A'
'B'
'X'
'T'
end
calc.Now ?
false
true
load from file
Input : ranges, parameters
calc.array [31][31*9][31]
m.252
'select graph.'
1
2
9
10
11
12
13
'HCl'
'InCl'
'GaCl₃'
'log10'
'Style'
'Color'
Select array
Draw animation
Save to file
true
false
Save array
End

фиг.2


Partial Pressure of InCl2 /atm/
Temperature ° C
Parameters X = 0.3000 B = 0.00e+000 , A = 1.00e-002
Partial Pressures /atm/
Temperature °C
H2
InCl
P4
P2
GaCl
HCl
InCl2
InCl3
GaCl3
Partial pressure of InCl2
X = 0.4000
B = 0.00e+0
Temperature °C
Lg10 /Parameter A/
Partial pressure of As2
X = 0.3000
Parameter B
Lg10 /Parameter A/
Log10 / Partial pressure of H2 /
Fix parameter
Parameter B
Temperature / °C /
Parameter X
Partial pressure of InCl2
Temperature / °C /
Parameter X

фиг.3.