

СОЗДАНИЕ ПЕРВИЧНОЙ РАСПЛАВЛЕННОЙ ЗОНЫ В КОНЦЕ СПЛАВА ПРИ УСЛОВИИ, КОГДА КОЭФФИЦИЕНТ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МЕНЬШЕ ЕДИНИЦЫ

Гахраманов Н.Ф.¹, Гараев Э.С.², Алекперов Э.Ш.³, Бархалов Б.Ш.⁴,
Гашимова А.И.⁵ Email: Gahramanov1158@scientifictext.ru

¹Гахраманов Надир Фаррух оглу – доктор физико-математических наук, профессор,
кафедра общей физики и методики преподавания физики;

Бакинский государственный университет;

²Гараев Эльдар Самед оглу - кандидат физико-математических наук, доцент;
главный научный сотрудник,

лаборатория твердотельной электроники,

Институт физики

Национальная академия наук Азербайджана;

³Алекперов Эльдар Шахсувар оглу - кандидат физико-математических наук, доцент,
кафедра общей физики и методики преподавания физики,

Бакинский государственный университет,

г. Баку;

⁴Бархалов Бархал Шабан оглу - доктор физико-математических наук, профессор,
кафедра физики твердого тела и полупроводников;

⁵Гашимова Айнуур Ихтияр кызы – доктор философии по физике,
кафедра общей физики и методики преподавания физики,

Сумгаитский государственный университет,

г. Сумгаит,

Азербайджанская Республика

Аннотация: в случае, когда коэффициент распределения (k) меньше единицы, имеется два варианта создания первичной расплавленной зоны в исходном слитке. В настоящей работе рассматривается создание расплавленной зоны в конце исходного слитка. Процесс осуществляется в двух разных режимах кристаллизации. Поэтому для определения распределения состава вдоль слитка уравнение непрерывности решается при двух различных начальных условиях, а затем эти решения объединяются. Результаты применены к бинарной системе Ge-In. Распределение состава в основной части слитка остается постоянным и его можно использовать в качестве подпитывающего слитка.

Ключевые слова: бинарная система, расплав, коэффициент распределения, режим кристаллизации, подпитывающий слиток.

CREATING PRIMARY MELTED ZONE AT THE END OF THE ALLOY UNDER THE CONDITION WHEN THE COEFFICIENT OF DISTRIBUTION IS LESS THAN UNIT

Gahramanov N.F.¹, Garayev E.S.², Alekperov E.Sh.³, Barkhalov B.Sh.⁴, Gashimova A.I.⁵

¹Gahramanov Nadir Farruh - Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor;

DEPARTMENT OF GENERAL PHYSICS AND METHODS OF TEACHING PHYSICS,

BAKU STATE UNIVERSITY;

²Garayev Eldar Samed - Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate-Professor, Chief Researcher,

LABORATORY OF SOLID-STATE ELECTRONICS,

INSTITUTE OF PHYSICS

NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF AZERBAIJAN

³Alekperov Eldar Shahsuvar - Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate-Professor,

DEPARTMENT OF GENERAL PHYSICS AND METHODS OF TEACHING PHYSICS,

BAKU STATE UNIVERSITY,

BAKU;

⁴Barkhalov Barkhal Shaban - Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor,

DEPARTMENT OF SOLID STATE AND SEMICONDUCTOR PHYSICS;

⁵Gashimova Aynur Ikhtiyar - PhD on Physics,

DEPARTMENT OF GENERAL PHYSICS AND PHYSICS TEACHING METHODOLOGY,

SUMGAI STATE UNIVERSITY,

SUMGAI,

REPUBLIC OF AZERBAIJAN

Abstract: when the distribution coefficient (k) is less than unit there are two cases of choosing the first melted zone in the initial alloy. Here we consider the case when the first melted zone is chosen in the end of the initial

alloy. The process has two stages of crystallization. Therefore to find the content distribution we solve the continuity equation for two different initial conditions and then unite them. The results have been applied to Ge - In ($k=0,001$) system. The content distribution in most parts of the alloy is constant on composition and it can be used as feeding alloy.

Keywords: binary system, melt, distribution coefficient, crystallization mode, feeding ingot.

УДК 546.28-121; 646.289

В случае, когда коэффициент распределения (k) меньше единицы, тогда возможны два варианта в зависимости от того, с какой стороны формируется первичная расплавленная зона.

Здесь мы рассмотрим случай, когда начальная расплавленная зона создается в конце сплава. Для этого случая изменение концентрации второго компонента вдоль исходного сплава выражается следующим образом [1]:

$$C_k(t) = kC_0 \left(\frac{vt}{L} \right)^{k-1}, \quad (1)$$

где L - общая длина сплава, полученного по методу Бриджмена, C_0 - средняя концентрация второго компонента, v - скорость его кристаллизации. В этом случае начальная концентрация второго компонента в первичной расплавленной зоне в общем виде определяется как [1]:

$$C_z(0) = C_0 \left(\frac{\ell}{L} \right)^{k-1}. \quad (2)$$

В качестве бинарной системы с $k < 1$ можно взять систему *Ge-In*. В этом случае коэффициент распределения индия в *Ge* составляет $k = 0,001$ [2]. Из [1] для системы *Ge-In* получаем общее решение уравнения непрерывности в следующем виде:

$$C_p(t) = \exp\left(-\frac{kv}{\ell}t\right) \left\{ C_0 \left(\frac{\ell}{kL} \right)^{k-1} \int y^{k-1} \exp y dy + A' \right\}, \quad (3)$$

где A' - постоянная интегрирования, а переменная интегрирования заменена следующим образом:

$$y = \frac{kv}{\ell}t \quad (4)$$

Здесь интеграл невозможно выразить аналитической форме по общему правилам. Однако, исследования показывают, что с незначительной ошибкой мы можем приблизительно выразить его аналитической форме.

Подынтегральное выражение состоит из произведения двух функций: $f_1(y) = y^{k-1}$ и $f_2(y) = \exp y$.

Построим график функции $f_2(y)$. Для этого присвоим величинам v , ℓ и L конкретные значения: $v = 2 \frac{\text{мм}}{\text{час}}$, $\ell = 10 \text{ мм}$, $L = 100 \text{ мм}$, здесь v - скорость смещения расплавленной зоны (рис. 1)

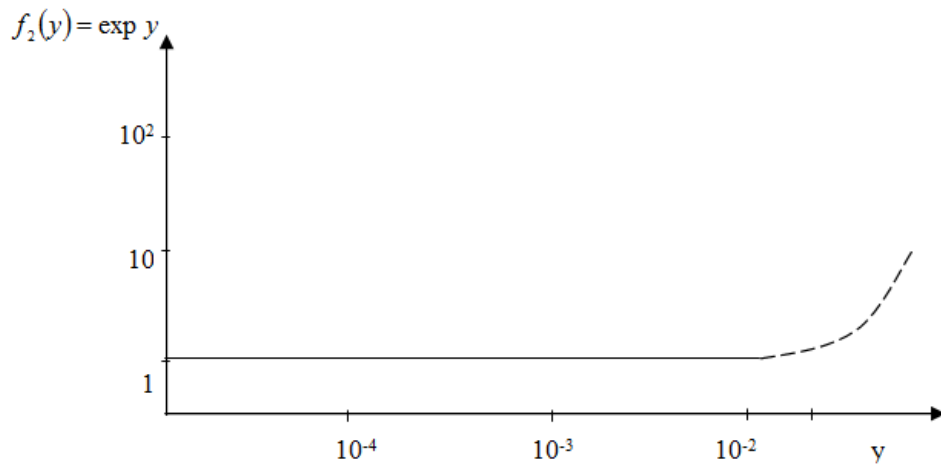


Рис. 1. График функции $f_2(y) = \exp y$

В таблице 1 приведены ряд значений аргумента (t или y) и функции $f_2(y)$.

Здесь, в исследуемых нами экспериментальных условиях для завершения процесса требуется время, равное $t_{\max} = \frac{100}{2}$ часов = 50 часов. Как видно из таблицы 1 и рис. 1, в интервале изменения значения t (0; 50 часов) значение y изменяется в диапазоне (0; 10^{-2}), т. е. во всем интервале изменения t значение y значительно меньше единицы ($y \ll 1$).

Таблица 1. Значения функции $f_2(y)$, принимаемые в зависимости от значений t и y

t , часы	y	$f_2(y) = \exp y$
0	0	1
1	$2 \cdot 10^{-4}$	1,00
10	$2 \cdot 10^{-3}$	1,01
20	$4 \cdot 10^{-3}$	1,01
30	$6 \cdot 10^{-3}$	1,01
40	$8 \cdot 10^{-3}$	1,01
50	$1 \cdot 10^{-2}$	1,02

Как видно из рис. 1 и таблицы 1, в рассматриваемом нами интервале изменения y , функция $\exp y$ изменяется между 1 и 1,02, то есть с ошибкой 1-2% мы можем считать $\exp y$ постоянной. Это означает, что мы можем вынести $\exp y$ как постоянную величину вперед знака интеграла. В этом случае интеграл в (3) легко выражается в аналитическом виде. Тогда мы можем интеграл в (3) представить таким образом (обозначим его через J_1):

$$J_1 = \int y^{k-1} \exp y dy \cong \exp y \int y^{k-1} dy = \exp y \cdot \frac{1}{k-1+1} y^{k-1+1} = \frac{1}{k} y^k \exp y \quad (5)$$

Выражение интеграла J_1 вставим в (3):

$$C_p(t) = \exp(-y) \left\{ C_0 \left(\frac{\ell}{kL} \right)^{k-1} \cdot \frac{1}{k} y^k \exp y + A' \right\} \quad (6)$$

Используя начальное условие, найдем постоянную интегрирования A' . При $t = 0$ (или $y = 0$) концентрация второго компонента в расплавленной зоне, как уже упоминалось ранее, определяется выражением (2). При $y = 0$ из (6) получаем:

$$C_p(0) = \frac{C_0}{k} \left(\frac{\ell}{k\ell} \right)^{k-1} \cdot 0 \cdot 1 + A'$$

С другой стороны, из (2) получаем:

$$C_p(0) = \frac{C_0}{k} \left(\frac{\ell}{k\ell} \right)^{k-1} \cdot 0 \cdot 1 + A'$$

Сравнивая два последних выражения, для A' находим:

$$A' = C_0 \left(\frac{\ell}{L} \right)^{k-1} \quad (7)$$

Вставим значение A' в (6):

$$\begin{aligned} C_p(t) &= \exp(-y) \left\{ \frac{C_0}{k} \left(\frac{\ell}{kL} \right)^{k-1} y^k \exp y + \tilde{N}_0 \left(\frac{\ell}{L} \right)^{k-1} \right\} = \\ &= \frac{C_0}{k} \left(\frac{\ell}{kL} \right)^{k-1} \{y^k + k \exp(-y)\} \quad 0 \leq t \leq \frac{L-\ell}{v} = t_1 \end{aligned} \quad (8)$$

После зонного плавления получим закон для изменения концентрации второго компонента в длине сплава $L - \ell$:

$$\begin{aligned} C_x(t) &= kC_y(t) = k \cdot \frac{C_0}{k} \left(\frac{\ell}{kL} \right)^{k-1} \{y^k + k \exp(-y)\} = \\ &= C_0 \left(\frac{\ell}{kL} \right)^{k-1} \{y^k + k \exp(-y)\} \quad 0 \leq t \leq t_1 = \frac{L-\ell}{v} \end{aligned} \quad (9)$$

До достижения передним фронтом конца расплавленной зоны сплава, зависимость (8) будет правомерной. После этого процесс будет осуществляться в режиме направленной кристаллизации.

После достижения передним фронтом конца расплавленной зоны сплава, вследствие изменения режима кристаллизации закон распределения состава на последней части сплава длиной ℓ кристалла будет отличаться от закона распределения (9). В этом случае уравнение непрерывности будет иметь вид [1]:

$$\frac{dC_p(t)}{C_p(t)} = \frac{(k-1)dt}{\frac{L}{v} - t} \quad (10)$$

и его решение будет:

$$C_p(t) = A'' \left(\frac{L}{v} - t \right)^{k-1}, \quad t \geq t_1 \quad (11)$$

Уже постоянная интегрирования A'' теперь будет выражаться по-другому. Чтобы найти ее, необходимо совместить решения (8) и (11) на момент $t_1 = \frac{L-\ell}{v}$.

На момент $t = t_1$ из (11) получаем:

$$C_p(t_1) = A'' \left(\frac{L}{v} - t_1 \right)^{k-1} \quad (12)$$

(здесь постоянную интегрирования мы обозначили через A'' , чтобы отличить ее от предыдущей).

Из (8) найдем $C_p(t_1)$:

$$C_p(t_1) = \tilde{N}_0 \left(\frac{\ell}{kL} \right)^{k-1} \left\{ \left(\frac{kvt_1}{\ell} \right)^k + k \exp\left(-\frac{kvt_1}{\ell}\right) \right\} \quad (13)$$

Приравняем правые части выражений (12) и (13):

$$A'' \left(\frac{L}{v} - t_1 \right)^{k-1} = C_0 \left(\frac{\ell}{kL} \right)^{k-1} \left\{ \left(\frac{kvt_1}{\ell} \right)^k + k \exp\left(-\frac{kvt_1}{\ell}\right) \right\}$$

Отсюда найдем A'' :

$$A'' = C_0 \left(\frac{\frac{\ell}{kL}}{\frac{L}{v} - t_1} \right)^{k-1} \left\{ \left(\frac{kvt_1}{\ell} \right)^k + k \exp\left(-\frac{kvt_1}{\ell}\right) \right\} \quad (14)$$

Произведем такое упрощение:

$$\frac{\frac{\ell}{kL}}{\frac{L}{v} - t_1} = \frac{\frac{\ell}{kL}}{\frac{L}{v} - \frac{L-\ell}{v}} = \frac{\frac{\ell}{kL}}{\frac{\ell}{v}} = \frac{v}{kL} \quad (15)$$

Если учесть (15), и вставить (14) в (11), получим:

$$\begin{aligned} C_p(t) &= \tilde{N}_0 \left(\frac{v}{kL} \right)^{k-1} \left\{ \left(\frac{kvt_1}{\ell} \right)^k + k \exp\left(-\frac{kvt_1}{\ell}\right) \right\} \left(\frac{L}{v} - t \right)^{k-1} = \\ &= \tilde{N}_0 \left\{ \left(\frac{kvt_1}{\ell} \right)^k + k \exp\left(-\frac{kvt_1}{\ell}\right) \right\} \left(\frac{L-vt}{kL} \right)^{k-1} \quad t_1 \leq t \leq \frac{L}{v} = t_2 \end{aligned} \quad (16)$$

Находим изменение концентрации второго компонента в длине ℓ конца сплава в следующем виде:

$$C_x(t) = kC_p(t) = k \cdot C_0 \left\{ \left(\frac{kvt_1}{\ell} \right)^k + k \exp\left(-\frac{kvt_1}{\ell}\right) \right\} \left(\frac{k\ell}{L-vt} \right)^{1-k} \quad t_1 \leq t \leq t_2 \quad (17)$$

Здесь принимая во внимание, что здесь $k < 1$, мы сделали изменение в последнем множителе.

Если мы объединим (8) и (17), то получим закон изменения концентрации второй компоненты по всей длине сплава:

$$C_x(t) = \begin{cases} C_0 \left(\frac{\ell}{kL} \right)^{k-1} \left\{ \left(\frac{kvt}{\ell} \right)^k + k \exp\left(-\frac{kvt}{\ell}\right) \right\} & 0 \leq t \leq t_1 \\ C_0 k \left\{ \left(\frac{kvt_1}{\ell} \right)^k + k \exp\left(-\frac{kvt_1}{\ell}\right) \right\} \cdot \left(\frac{k\ell}{L-vt} \right)^{1-k} & t_1 \leq t \leq t_2 \end{cases} \quad (18)$$

Для системы $Ge - In$ (при $k = 0,001$) вдоль изготовленного таким образом слитка зависимость отношения $\frac{C_x(t)}{C_0}$ от t из (18) (то есть, относительное распределение концентрации индия вдоль слитка)

показана на рис. 2 и в таблице 2.

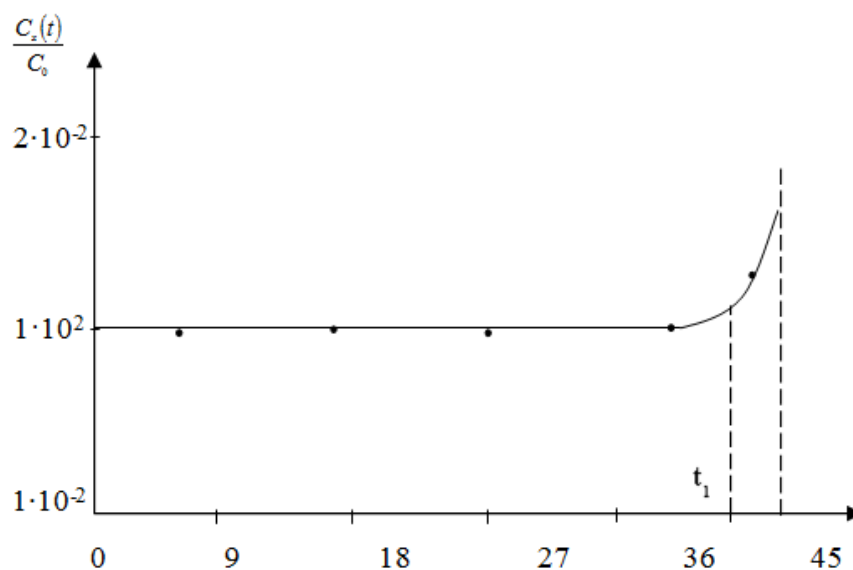


Рис. 2. Распределение In вдоль слитка

Таблица 2. Распределение относительного содержания In из (18) и полученного из эксперимента

t , часы	$\frac{C_x(t)}{C_0}$	t , часы	$\frac{C_x(t)}{C_0}$
0	0,01	25,0	0,01
2,5	0,01	27,5	0,01
5,0	0,01	30,0	0,01
7,5	0,01	32,5	0,01
10,0	0,01	35,0	0,01
12,5	0,01	37,5	0,01
15,0	0,01	40,0	0,01
17,5	0,01	42,5	0,01
20,0	0,01	45,0	0,01
22,5	0,01	47,5	0,02

На рисунке точками указаны экспериментальные полученные значения сплава «германий-индий». Концентрация индия была определена из измерений эффекта Холла на образцах, изготовленных в виде параллелепипеда из сплава.

Из рис. 2 видно, что изготовленный таким образом сплав очень подходит для получения монокристаллов бинарных твердых растворов с постоянным составом. Резкое увеличение концентрации второго компонента в длине $\ell = 10 \text{ мм}$ конца сплава не препятствует процессу выращивания, так как эта часть сплава используется для закрепления питающего вещества в держателе и не участвует в питании расплава (она остается неиспользованной). Вместе с тем, при необходимости беря ширину расплавленной зоны достаточно большой и расходуя часть этого конца сплава, можно получить монокристаллический материал, пригодный для изготовления варизонных структур.

Список литературы / References

1. Тагиров В.И. Основы физики полупроводников. Баку-Сумгаит, 2012. 445 с.
2. Тагиров В.И., Гахраманов Н.Ф. Выбор монокристаллического ядра и геометрической структуры сплава при получении монокристаллов бинарных твердых растворов методом зонной плавки // Известия Сумгайтского Государственного Университета, 2011. Т. 11. В. 4. С. 3-13.
3. Машовец Т.В. Точечные дефекты в алмазаподобных полупроводниках. Автореферат док.дисс. Ленинград, 1984. С. 235.
4. Мецик М.С., Голубь Л.М., Ларионов М.П. и др. Электрическая активность поверхности кристаллов // Известия АН СССР. Неорг.Материалы, 1984. Т. 20. № 5. С. 834-836.
5. Yershov M., Liu H.C., Buchanan M. et al. // Appl. Phys. Lett., 1997.V. 70. P. 414.
6. Abbasov Sh.M. Semiconductor vibrational frequency response sensor for pressure measurement // J. Fizika, 2001. V. 7. № 3. P. 16-18.