

Кафедра Компьютерных технологий

Отчет по проекту по курсу «Численные методы», 2 семестр III курса 2018 г.

**Моделирование роста монокристаллического твердого раствора
 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ методом хлоридной эпитаксии**

Выполнили:

Антонов Кирилл М3338

Игнашов Иван М3339

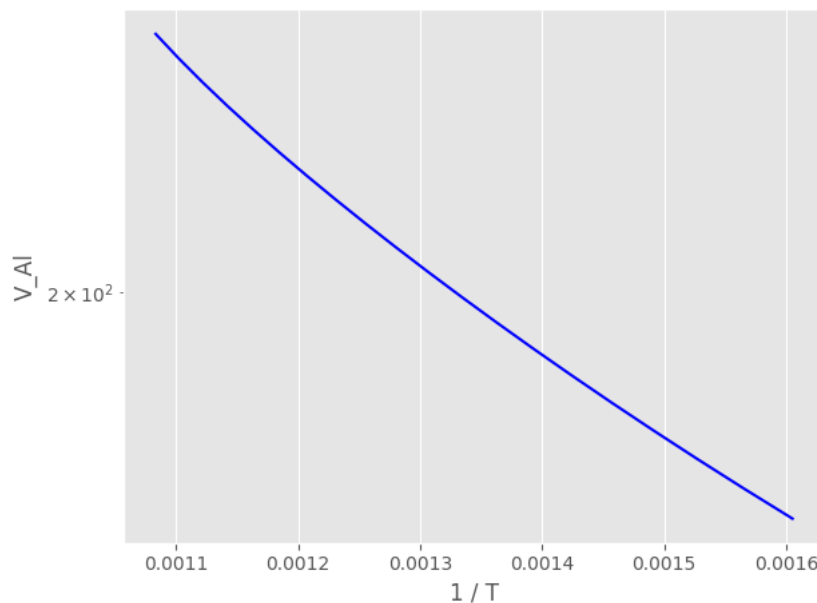
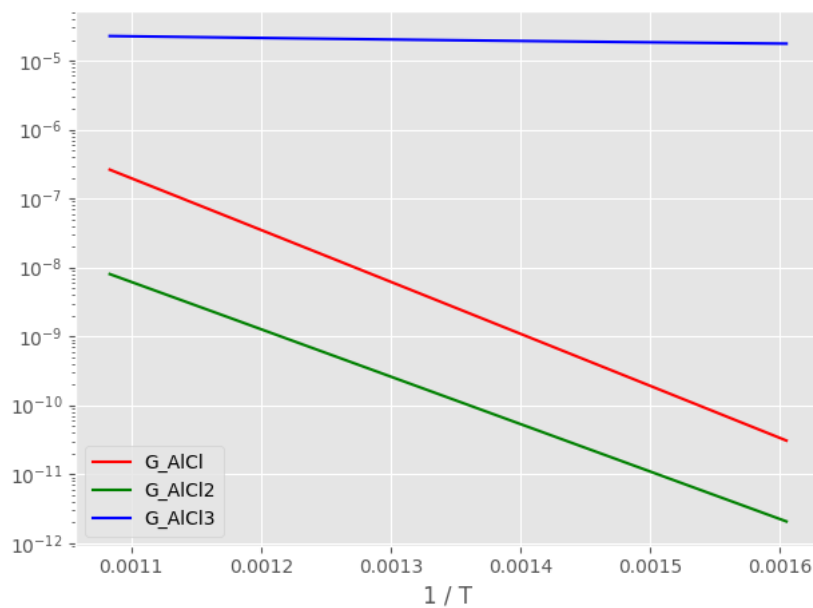
Киселев Владислав М3339

Родионова Анна М3339

Шкарупин Данил М3339

Задание 1

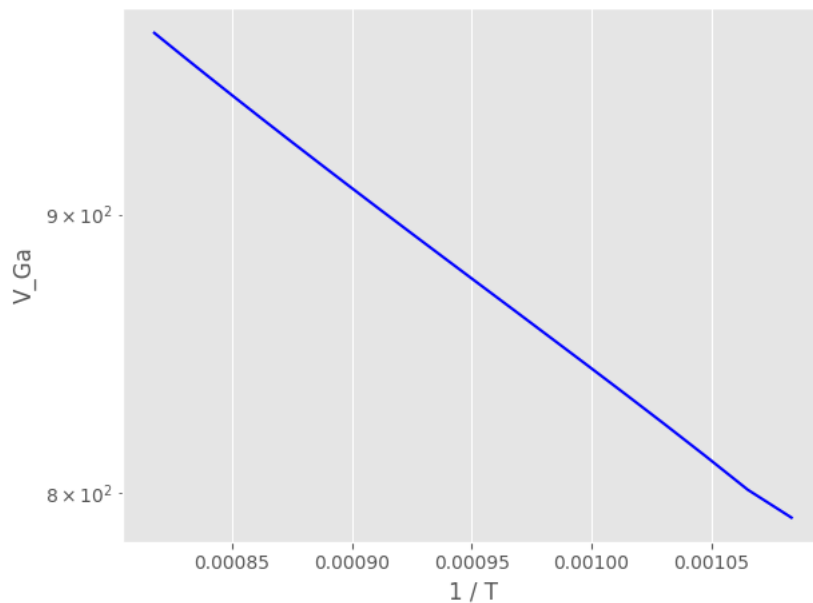
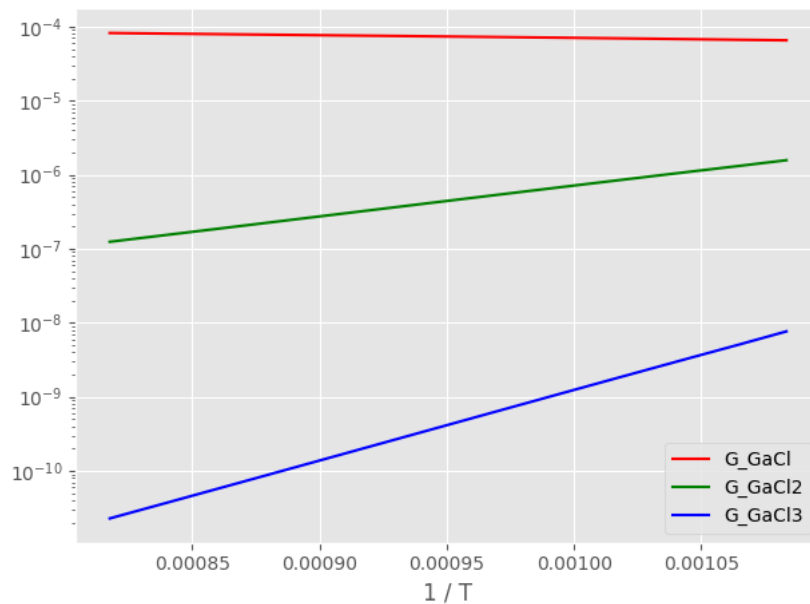
Найти межфазные потоки G_i Al-содержащих компонент ($i = \text{AlCl}$, AlCl_2 и AlCl_3) на поверхности твердого алюминия и скорость испарения источника алюминия V_{Al}^e в зависимости от температуры T , для чего решить систему уравнений (2)-(6) при разных значениях температуры. Построить графики полученных зависимостей в координатах $\ln(\dots)-1/T$ (т.н. диаграммы Аррениуса). Расчеты провести при следующих значениях входящих в систему величин: $P_{\text{AlCl}}^g = P_{\text{AlCl}_2}^g = P_{\text{AlCl}_3}^g = P_{\text{H}_2}^g = 0$, $P_{\text{HCl}}^g = 10000 \text{ Па}$, $P_{\text{N}_2}^g = 90000 \text{ Па}$ (полное давление в источнике $P = P_{\text{HCl}}^g + P_{\text{N}_2}^g$ - атмосферное, т.е. примерно 100000 Па), $\delta = 0.01 \text{ м}$, T меняется в диапазоне $350\text{-}650 \text{ }^\circ\text{C}$. Показать, что преобладающим Al-содержащим компонентом, выходящим из источника, является трихлорид алюминия (AlCl_3).



Т. о. из первого графика видим, что преобладающим Al-содержащим компонентом, выходящим из источника, является AlCl_3 . (+)

Задание 2

Найти межфазные потоки G_i Ga-содержащих компонент ($i = \text{GaCl}$, GaCl_2 и GaCl_3) на поверхности жидкого галлия и скорость испарения источника галлия V_{Ga}^e в зависимости от температуры T , для чего решить систему уравнений (8)-(12) при различных значениях температуры. Построить графики полученных зависимостей в координатах $\ln(\dots)-1/T$. Расчеты провести при следующих значениях входящих в систему величин: $P_{\text{GaCl}}^g = P_{\text{GaCl}_2}^g = P_{\text{GaCl}_3}^g = P_{\text{H}_2}^g = 0$, $P_{\text{HCl}}^g = 10000 \text{ Па}$, $P_{\text{N}_2}^g = 90000 \text{ Па}$ (полное давление в источнике $P = P_{\text{HCl}}^g + P_{\text{N}_2}^g$ - атмосферное), $\delta = 0.01 \text{ м}$, $T = 650\text{-}950 \text{ }^\circ\text{C}$. Показать, что преобладающим Ga-содержащим компонентом, выходящим из источника, является монохлорид галлия (GaCl).



Т. о. из первого графика видим, что преобладающим Ga-содержащим компонентом, выходящим из источника, является GaCl . (+)

Задание 3

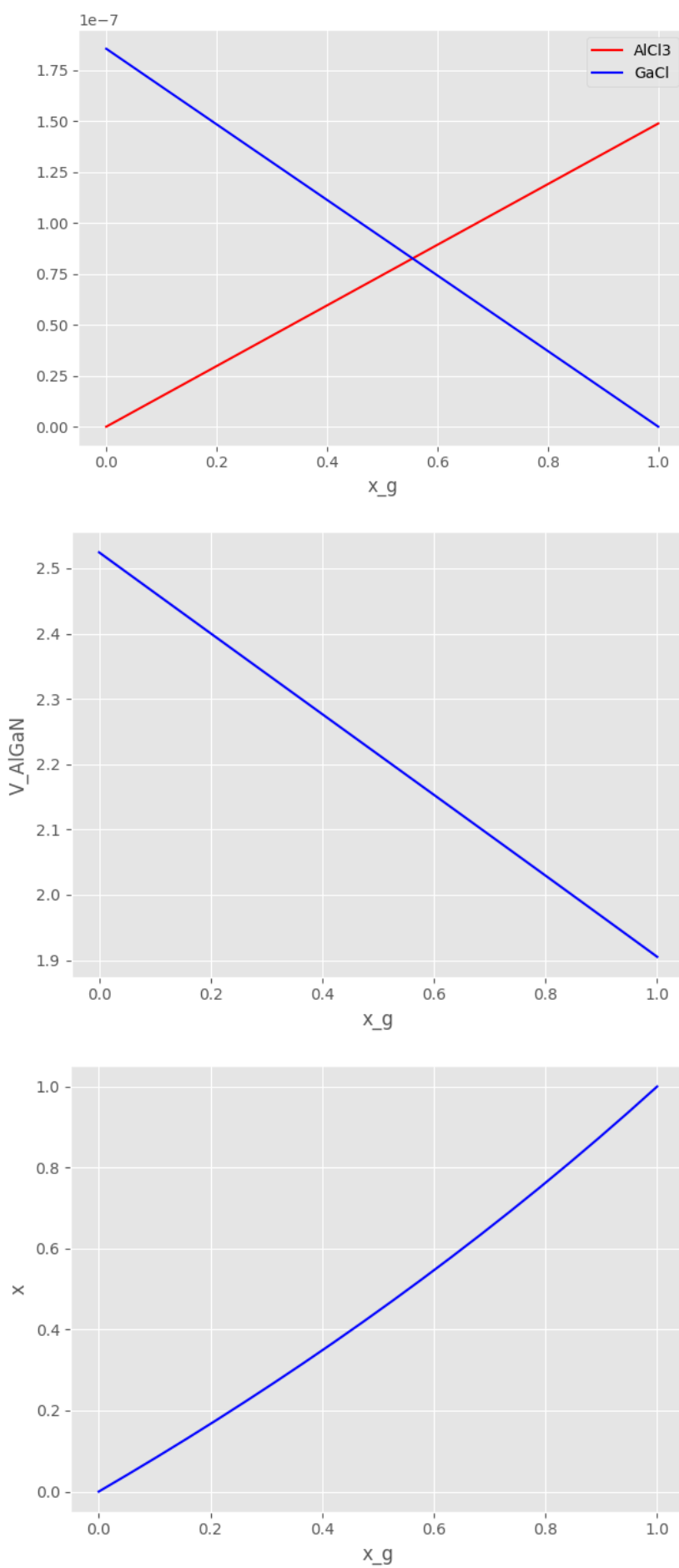
Найти межфазные потоки G_i компонент $AlCl_3$ и $GaCl$ на ростовой поверхности, а также скорость роста слоя V_{AlGaN}^g и долю AlN -составляющей в твердом растворе x в зависимости от доли $AlCl_3$ в газообразных хлоридах – величины $x^g = P_{AlCl_3}^g / (P_{AlCl_3}^g + P_{GaCl}^g)$. С этой целью решить систему уравнений (14)-(19) при различных значениях x^g из полного диапазона от 0 до 1. Построить графики полученных зависимостей в координатах (...)– x^g , в частности, график $x=f(x^g)$ – т.н. диаграмму вхождения алюминия в кристалл. Расчеты провести при следующих значениях входящих в систему величин: $P_{HCl}^g = 0$, $P_{AlCl_3}^g + P_{GaCl}^g = 30$ Па, $P_{NH_3}^g = 1500$ Па, $P_{H_2}^g + P_{N_2}^g = 98470$ Па (полное давление в реакторе $P = P_{AlCl_3}^g + P_{GaCl}^g + P_{NH_3}^g + P_{H_2}^g + P_{N_2}^g$ - атмосферное), $\delta = 0.01$ м, $T = 1100$ °С. Рассмотреть два случая: 1) $P_{H_2}^g = 0$ (несущий газ – чистый N_2) и 2) $P_{H_2}^g / P_{N_2}^g = 0.1/0.9$ (несущий газ – 10%-ая смесь H_2 и N_2). Показать, что в первом случае диаграмма вхождения Al в кристалл близка к линейной, а во втором представляет собой сильно выпуклую линию (доля алюминия в кристалле резко превышает долю $AlCl_3$ в газообразных хлоридах). Сравнить полученные результаты с экспериментальными данными работы [1] и объяснить изменение диаграммы при добавлении малого количества H_2 .

Из графиков, представленных ниже, видим:

1. В первом случае (чистый N_2) диаграмма вхождения Al в кристалл близка к линейной, а во втором (смесь N_2 и H_2) представляет собой сильно выпуклую линию (доля Al в кристалле резко превышает долю $AlCl_3$ в газообразных хлоридах). (+)
2. При добавлении водорода скорость протекания реакции для:
 - GaN - замедляется
 - AlN - не изменяется

Из-за этого в случае с добавлением водорода галлия образуется меньше, чем в случае с отсутствием водорода.

1) Только с N₂



2) Смесь N_2 и H_2

