

Міністерство освіти і науки України
Східноукраїнський національний університет ім. В. Даля
Інститут хімічних технологій СХУ ім. В. Даля (м. Рубіжне)
Науково-технічна установа «ІХТПЕ» (м. Рубіжне)
КЗ «Луганська обласна мала академія наук учнівської молоді»
Інститут екології, економіки і права (м. Київ)
Сумський державний педагогічний університет ім. А.С. Макаренка
Інститут економіко-правових досліджень НАН України (м. Київ)
ТОВ НВП «Зоря»
ТОВ НВП «Мікрохім»

МАТЕРІАЛИ
VI ВСЕУКРАЇНСЬКОЇ НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ
КОНФЕРЕНЦІЇ

«АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ НАУКОВО-
ПРОМИСЛОВОГО КОМПЛЕКСУ РЕГІОНІВ»



13-17 квітня 2020, Рубіжне

Міністерство освіти і науки України
Східноукраїнський національний університет ім. В. Даля
Інститут хімічних технологій СХУ ім. В.Даля (м. Рубіжне)
Науково-технічна установа «ІХТПЕ» (м. Рубіжне)
КЗ «Луганська обласна мала академія наук учнівської молоді»
Інститут екології, економіки і права (м. Київ)
Сумський державний педагогічний університет ім. А.С.Макаренка
Інститут економіко-правових досліджень НАН України (м. Київ)
ТОВ НВП «Зоря»
ТОВ НВП «Мікрохім»

МАТЕРІАЛИ
VI ВСЕУКРАЇНСЬКОЇ НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ
КОНФЕРЕНЦІЇ

«АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ НАУКОВО-
ПРОМИСЛОВОГО КОМПЛЕКСУ РЕГІОНІВ»



13-17 квітня 2020, Рубіжне

УДК 001.89:332.1
А-437

Рекомендовано до друку
Вченою радою Інституту хімічних технологій
Східноукраїнського національного університету
імені Володимира Даля (м. Рубіжне)
(протокол № 7 від 28 травня 2020 р.)

Актуальні проблеми науково-промислового комплексу регіонів. Матеріали VI Всеукраїнської науково-технічної конференції, 13-17 квітня 2020 р., м. Рубіжне / О.А. Колпакова, І.М.Свилогузов. – Рубіжне: видавець О. Зень, 2020. – 317 с.

ISBN 978-617-601-318-1

У збірнику опубліковано матеріали VI Всеукраїнської науково-технічної конференції, які висвітлюють широке коло питань, пов'язаних із теоретичними та прикладними проблемами регіонів. Рекомендовано для наукових працівників, спеціалістів науково-дослідних установ, студентів, магістрантів, аспірантів, докторантів і викладачів вищих навчальних закладів, фахівців системи освіти і науки.

Відповідальність за зміст і достовірність поданих матеріалів випуску несуть автори наукових статей. Точки зору авторів публікації можуть не співпадати з точкою зору редколегії збірника.

УДК 001.89:332.1

ISBN 978-617-601-318-1 © IXТ СТУ ім. В. Даля (м. Рубіжне), 2020

РАСЧЕТ ГЕТЕРОЭПИТАКСИАЛЬНОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ В БИНАРНЫХ СИСТЕМАХ

Василенко Н.А.

НИ ИФМИТ ЛНУ им. Т. Шевченко (г. Рубежное)

Несмотря на многочисленные и экспериментальные исследования до сих пор не разработана общепринятая теория эпитаксии. Это затрудняет прогнозирование возможности ориентированного нарастания материала в конкретной бинарной системе, а значит, не позволяет получать покрытия с заданными структурным совершенством, обеспечивающим требуемые и стабильные физические свойства изготавливаемых устройств. В данной работе предлагается наиболее общий макроскопический подход к эпитаксии (включая хемоэпитаксию), поскольку он учитывает в общем изменение потенциала Гиббса при образовании зародышей энергии трехфазной реакции на границе подложка-осаждаемый слой, что позволяет описывать все основные виды эпитаксии. В своем подходе мы исходим из того, что эпитаксия контролируется прежде всего энергетикой процесса. Наблюдаемая при эпитаксии фазовая и структурная неравновесность нарастающей фазы обусловлена минимизацией свободной энергии системы. Степень совершенства ориентации этой фазы на кристаллическую подложку также определяется главным образом силами межфазного взаимодействия на границе. Геометрическое же соответствие сопрягаемых решеток играет второстепенную роль, хотя нередко весьма существенную.

Данный подход базируется на классической теории зародышеобразования. При этом вводятся следующие допущения.

1. Эпитаксиальное зарождение связано с преимущественным образованием двумерных зародышей нарастающей фазы (β -фазы), т.е. энергия их формирования меньше энергии образования трехмерных зародышей. Такое толкование эпитаксии проводилось многими авторами.

2. Подложка, на которой происходит эпитаксиальное нарастание вещества, имеет идеальное кристаллическое строение.

3. Имеет место преимущественная диффузия атомов адсорбированного на подложке слоя (атомов В) в решетку подложки, состоящей из атомов А, т.е. $D_B > D_A$. В этом случае поверхность раздела зародыш β -фазы – подложка наибольшая и обусловленное действием подложки уменьшение поверхностной энергии определяется в первую

очередь значением удельной свободной поверхностной энергии границы раздела зародыш – подложка. Зародыши β -фазы будут образовываться в основном в поверхностном слое решетки подложки.

4. Зародыши β -фазы имеют форму либо квадратных пластинок (двумерные), либо кубов (трехмерные). Подобная форма зародышей выбрана с целью упрощения анализа (расчета).

5. В процессе трехфазной реакции образуется лишь одно химическое соединение. Это допущение вполне правомерно, так как на начальной стадии роста обычно сначала формируется фаза, имеющая наибольшую скорость роста.

Зарождение и рост новой фазы (β -фазы) осуществляется по следующей модели. Атомы В, поступая из паровой фазы на поверхность подложки, формируют абсорбционный слой, и на его границе с подложкой при достижении необходимого пересыщения образуются зародыши β -фазы. Достигнув критических размеров, зародыши разрастаются, коалесцируют и образуют сплошной слой β -фазы. На поверхности этого слоя вновь возникают зародыши β -фазы, и процесс далее повторяется, обуславливая рост фазы по толщине.

Все описываемые выше приближения и процессы сводятся к одному – нахождению гетероэпитаксиальной температуры – температуры, при которой происходит рост кристалла с максимально оптимальными физическими, химическими и механическими свойствами. Однако из-за громоздкости формул и вычислений этот расчет не всегда доступен [1].

Автором была создана компьютерная программа на языке программирования Turbo Pascal, позволяющая на основе справочных и экспериментальных данных за считанные секунды получать результаты интервала гетероэпитаксиальной температуры, как в кельвинах, так и в градусах Цельсия.

Полученный температурный критерий эпитаксии позволяет проводить обобщение экспериментальных данных и прогнозирование возможности ориентированного нарастания вещества в конкретной бинарной системе. Нами на более чем 30 бинарных системах получено вполне удовлетворительное согласие теории и эксперимента. Погрешность расчета эпитаксиальной температуры составляет 30 – 50⁰С и связана главным образом с разбросом табличных данных по параметрам, входящим в расчетные формулы.

Список использованной литературы:

1. П.И. Игнатенко. Термодинамико-кинетическая теория эпитаксии // Физика и техника высоких давлений. 1999. т.9, №4. с.11-118.

НАУКОВЕ ВИДАННЯ

Матеріали

VI Всеукраїнської науково-технічної конференції

**«АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ
НАУКОВО-ПРОМИСЛОВОГО
КОМПЛЕКСУ РЕГІОНІВ»**

13-17 квітня 2020 року

Надруковано з готового оригінал-макету

Формат 60x84^{1/16}

Гарнітура Times New Roman.

Папір офсетний.

Умовн. друк. арк. 15,0.

Тираж 35 прим.

Видавець О. Зень

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи

серія РВ № 26 від 6 квітня 2004 р.

вул. Кн. Романа, 9/24, м. Рівне, 33022;

068-025-067-4; olegzen@ukr.net

Надруковано у ПП «ВКП «Петіт»

93400, м. Сєверодонецьк, Луганська обл.

вул. Федоренка, 10

(0645) 70-29-48