

Ga-In-As-Sb 系合金固-液平衡 和人工神经网络预报

严六明 吴 伟 张靖巍 陈念贻 彭瑞伍

(中国科学院上海冶金研究所 上海 200050)

摘要 本文用 DTA 法测量了 Ga-In-As-Sb 系合金的液相线温度,并用滑舟法在 GaSb 衬底上生长液相外延膜,并用电子探针法分析膜的成分.在此基础上利用实验数据和文献数据训练人工神经网络模型,神经网络模型用交叉检验法测试是否过拟合.经测试合格的神经网络可以预报液相线温度和外延层组成.

CCACC: 1230; PACC: 6470D, 7280E, 8115L

1 引言

Ⅲ-V 族四元合金半导体材料有许多优良性能,正愈来愈受广泛注意.四元合金半导体晶体大多用外延法获得,要得到性能优良的单晶材料,相图知识对选取合适的实验条件是必须的.测量完整的四元系相图非常困难,有必要发展理论或经验方法计算预报相图.目前,四元系相图计算模型都以简单溶液近似为基础,在该近似基础上发展起来的 IPJ (Ilegems-Panish-Jordan) 模型^[1,2]和 DLP (Delta-Lattice-Parameter) 模型^[3]是比较成功的两个.这两个模型能解释实验固液相图,也能预报相图.但除少数晶格极匹配的情况外,大多数情况下理论与实验相差较大.

用差热分析法测量 Ga-In-As-Sb 系一些液相线温度和 GaSb 衬底(100)面上液相外延层 $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ 的组成.在此基础上用人工神经网络拟合预报这些数据,结果比较满意.

2 实验部分

2.1 实验方法

本文使用上海天平仪器厂生产的 CDR-1 型差动热分析仪和德国 Netzsch 公司生产的 STA429 型瞬态热分析仪,实验在氩气保护气氛下进行.测量时,先精确称量纯度 99.9999%

严六明 男,1965 年生,工学博士,物理化学专业,现在通讯地址:上海市华东理工大学化学系,邮编 200237

吴 伟 男,1967 年生,博士研究生,冶金物化专业

1993 年 11 月 16 日收到初稿,1994 年 1 月 6 日收到修改稿

的 Ga、In、Sb 和 GaSb 四种材料,置于液相外延炉中,在 675℃下恒温 4 小时,使样品混合均匀.然后,将熔好的样品研细,进行差热分析^[4].

液相外延(LPE)生长 $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$, Sb_{1-y} 用滑动舟法,在外延炉中进行.实验在氩气气氛下进行,并用恒温系统控温,使用 GaSb 衬底,用电子探针法测量外延层成分^[5].

2.2 实验结果

差热分析(DTA)实验结果列于表 1,其中 T_h 和 T_c 分别为样品加热和冷却 DTA 曲线转折点温度.由于过冷效应使 T_c 低于液相线温度 T_l ,而固体的熔化潜热使 T_h 高于 T_l .本文取 T_h 和 T_c 的平均值作为样品的液相线温度实验值 T_l .表 1 中还列出人工神经网络交叉预报结果 T_a .

液相外延法液相组成和外延层成分的实验结果列于表 2 中.

表 1 DTA 实验结果与 ANN 交叉预报值

x_{Ga}^I	x_{In}^I	x_{Sb}^I	$x_{\text{As}}^I \times 10^3$	T_h	T_c	T_l	T_a
	1			162	153	157.5	160.7
0.1235	0.608	0.267	1.50	580	508	544	543.8
0.1445	0.594	0.26	1.50	621	473	547	544.9
0.1445	0.594	0.26	1.32	548	536	542	545.3
0.1448	0.594	0.26	1.22	561	520	540.5	545.4
0.1448	0.594	0.26	1.20	557	511	534	545.4
0.1699	0.584	0.245	1.12	586	483	534.5	541.0
0.214	0.56	0.225	0.858	542	515	528.5	536.3
0.331	0.478	0.19	0.669	583	513	548	542.1
0.331	0.478	0.19	0.665	555	537	546	542.0
0.331	0.478	0.19	0.602	570	514	542	541.0
0.331	0.478	0.19	0.591	560	522	541	540.8
0.331	0.478	0.19	0.565	570	503	536.5	540.4
0.457	0.39	0.153	0.388	538.5	525	531.8	545.5
0.5		0.5		729	696	712.5	708.4
0.1448	0.594	0.26	1.24	540	539	539.5	545.4
0.123	0.608	0.267	1.52	573	519	546	543.6

表 2 液相外延结果与 ANN 预报值

x_{Ga}^I	x_{In}^I	x_{Sb}^I	$x_{\text{As}}^I \times 10^3$	T_h	T_c	T_l	T_a
0.332	0.4776	0.1895	0.622	0.075	0.06	0.090	0.085
0.332	0.4774	0.1895	0.674	0.091	0.087	0.087	0.090
0.332	0.4775	0.1895	0.669	0.081	0.092	0.087	0.089
0.332	0.4775	0.1895	0.669	0.095	0.087	0.087	0.089
0.332	0.4777	0.1896	0.678	0.083	0.093	0.087	0.090
0.332	0.4775	0.1894	0.689	0.08	0.09	0.086	0.091

3 计算部分

3.1 计算方法

人工神经网络(Artificial Neural Network,ANN)是一类模拟生物体神经系统结构的新型信息处理系统,具有自适应和自学习功能,特别适合于模式识别和复杂的非线性函数关系

拟合等,是从大量实验数据中总结经验规律的有力手段^[8,9]. 本文所选人工神经网络有三层: 输入层, 隐藏层和输出层. 神经网络的输入是 Ga-In-As-Sb 系的液相原子分数, 输出分别是液相线温度和外延层 $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ 的 x 和 y 值. 输入层和输出层的神经元数分别与输入和输出参数对应, 隐藏层的神经元数通过尝试法优化确定. 输入层的转换函数取线性, 隐藏层和输出层的转换函数用对称的正切双曲函数. 神经网络采用 BP 算法 (Back-propagation Algorithm) 训练, 用美国 Neuralware Inc. 的 Neuralworks Explorer 程序, 在 486 微机上计算.

3.2 计算结果

3.2.1 Ga-In-As-Sb 系固相点温度的神经网络预报

用 Ga-In-As-Sb 系液相原子分数 x_{Ga} 、 x_{In} 、 x_{As} 和 x_{Sb} 作为人工神经网络的输入模式, 该组分的液相线温度 T_l 作输出, 训练神经网络. 网络隐藏层神经元数取 2, 训练数据包括本文和 Joullie 等^[7]报道的 30 个不同组成的 Ga-In-As-Sb 体系的成分和相应的 T_l 的实测值. 训练样本集分六组, 每组五个样本. 每次取其中的五组训练神经网络, 并用训练好的网络预报不参加训练的那组样本的 T_l , 以交叉检验网络的预报能力. 图 1 六个神经网络对 30 个训练样本 T_l 的交叉预报值和实测结果的对比, 结果较满意.

3.2.2 液相外延层 $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ 的 x 和 y 值的预报

用相似方法可预报与液相 Ga-In-As-Sb 平衡固相 $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ 的 x 和 y 值. 这里所用输入和隐藏层神经元数与 2.1 相同的人工神经网络, 输出有两个, 它们是 x 和 y . 训练样本有 19 个, 分六组, 除一组有四个样本外, 每组各有三个样本. 用交叉检验法训练六个神

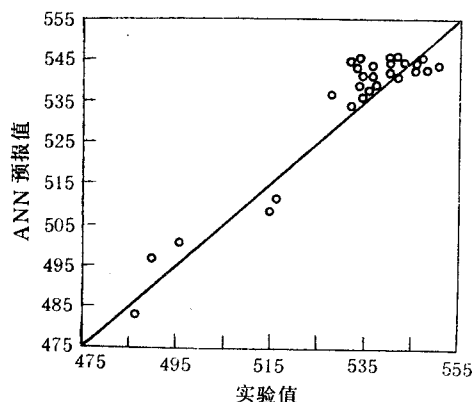


图 1 液相线温度 T_l 实测值与神经网络预报值的对比

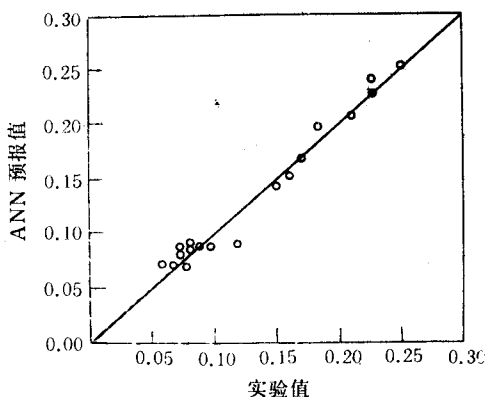


图 2 GaAs 衬底上液相外延 $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ 的 In 含量 x 与人工神经网络预报值对比

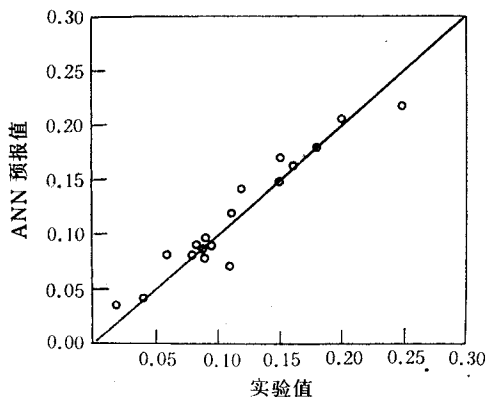


图 3 GaAs 衬底上液相外延 $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ 的 As 含量 y 与人工神经网络预报值对比

神经网络,并预报不参加训练样本的 x 和 y 值. x 、 y 的实测值与神经网络预报值的对比如图 2、图 3 所示,亦为满意结果.

4 讨论

液相外延法生长 $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$, 外延温度和液相组分折选取需要四元系相图知识.

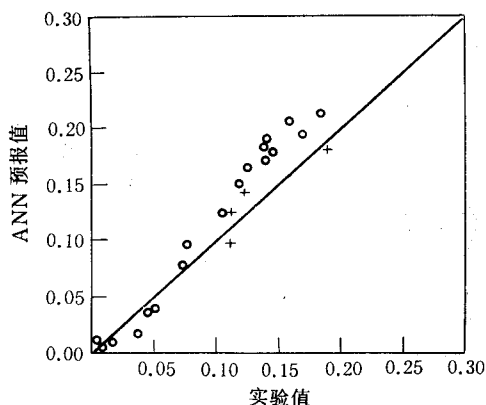


图 4 Dewinter 等液相外延生长 $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ 的 As 含量与神经网络预报值对比
○为 Dweinter 的结果, + 为我们的实验结果

本文在实验基础上,利用实验和文献数据,训练人工神经网络,建立神经网络模型,可以预报 Ga-In-As-Sb 系液相线温度和外延层组成,结果较好. 与近似的 DLP 和 IPJ 理论模型相比,人工神经网络不但可以预报液相线温度,还能预报外延层组成,且不受体系晶格匹配度的影响. 为了验证本方法的可靠性,本文用 Dewinter 等^[6]实验所选液相原子分数作前面训练好的神经网络的输入,网络“预报”固相 As 含量与实验对比如图 4,亦为满意结果. 图中也表出了我们最近的四组实验结果^[5].

人工神经网络法与其它非线性拟合相比,不需要选择回归模型,只需根据影响因素多少,确定输入层神经元数目和输入参数. 经过训练的神经网络就可完成特定的任务. 神经网络还具有容错性,不完整的数据对它的结果影响也较小,是较好的预报相图的经验方法. 但神经网络模型物理意义不够明确、直观,有时要发生过拟合现象,这是人工神经网络的缺点.

参 考 文 献

- [1] A. S. Jordan and M. Ilegems, J. Phys. Chem. Solids., 1975, **36**:329.
- [2] M. Ilegems and M. B. Panish, J. Phys. Chem. Solids, 1974, **35**:409.
- [3] G. B. Stringfellow, J. Phys. Chem. Solids. 1973, **34**:1749.
- [4] 张靖巍, GaInAsSb 材料的液相外延及其相图研究,中国科学院上海冶金研究所硕士毕业论文, 1989. 9.
- [5] 徐春梅等, 将在 Rare Metal 上发表.
- [6] J. C. Dewinter, M. A. Pollack, A. K. Srivastave and J. L. Zyskind, J. Electronic materials, 1985, **14**:729.
- [7] A. Joullie, *et al.*, J. Crystal Growth. 1986, **75**:309.
- [8] R. P. Lippmann. IEEE ASSP magazine, 1987, **3**:4.
- [9] J. J. Hopfield, Proc. Natl Acad. Sci. USA, 1982, **79**:2554 & 1984, **81**:3088.

Solid-Liquid Equilibrium of Ga-In-As-Sb System and Artificial Neural Network Prediction

Yan Liuming, Wu Wei, Zhang Jingwei, Chen Nianyi and Peng Ruiwu

(Shanghai Institute of Metallurgy, The Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200050)

Received 16 November 1993, revised manuscript received 6 January 1994

Abstract Measurement and computer prediction of the Ga-In-As-Sb solid-liquid equilibrium are reported. The liquidus data are obtained by DTA, and the solidus data are determined by liquid phase epitaxial method. The artificial neural networks, trained by use of experimental data, can be used to predict liquidus and solidus data. And cross-validation method is also employed to get rid of overfitting.

CCACC: 1230; **PACC:** 6470D, 7280E, 8115L