

УДК 621.382-181.4.774.002.5

Об одной модели расчета неравномерности слоя в методе молекулярно-пучковой эпитаксии. Майоров А.А., Филаретов А.Г., Цырлин Г.Э. // Научное приборостроение. Автоматизация научных исследований. Л.: Наука, 1988, с. 73

Расчетным путем исследован характер поведения коэффициента неравномерности в случае выращивания слоев $GaAs$ методом МПЭ в зависимости от взаимного расположения источника и подложки с учетом динамики роста. Предложены оптимальные геометрические параметры для реальных установок МПЭ для случаев неподвижной и вращающейся подложки с целью получения слоев с коэффициентом неравномерности менее 1%. Лит. - 10 назв., ил. - 5.

ОБ ОДНОЙ МОДЕЛИ РАСЧЕТА НЕРАВНОМЕРНОСТИ СЛОЯ В МЕТОДЕ МОЛЕКУЛЯРНО-ПУЧКОВОЙ ЭПИТАКСИИ

Метод молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) в последние 15-20 лет привлекает к себе пристальное внимание как с точки зрения фундаментальных исследований процессов роста кристаллов, так и как способ создания прецизионных полупроводниковых устройств. Особую ценность этому методу придает то, что он позволяет управляемо выращивать монокристаллические пленки толщиной в единицы моноатомных слоев, то, что, в свою очередь, дает возможность одновременно изучать и начальные стадии роста кристаллов, и создавать промышленным способом такие приборы, как, например, устройства быстродействующей памяти, НЕМТ-транзисторы, лазеры с квантовой ямой в активном слое и многие другие [1] .

Для дальнейшего развития МПЭ важной является проблема получения равномерных по толщине на поверхности подложки пленок [1] . Одним из простейших путей реше-

ния этой проблемы могло бы быть удаление подложки от источников молекулярных пучков так, чтобы изменение интенсивности молекулярного потока по поверхности подложки было пренебрежимо мало (или не превосходило заданного коэффициента неравномерности). Однако такой путь приводит к резкому снижению коэффициента использования расходуемых материалов и экономически не эффективен.

Введение в установки МПЭ манипуляторов с вращением образца позволяет решить проблему равномерности толщины выращиваемого слоя при разумных коэффициентах использования расходуемых материалов. При этом сообщаемые результаты колеблются от $\pm 1,5$ [2] до 1% и менее [3].

При достаточном количестве экспериментальных данных неясным остается вопрос о закономерности влияния взаимного расположения источников и подложки в ростовой камере установок МПЭ на неравномерность толщины выращиваемого слоя. Математическое описание процессов роста слоя и оценка неравномерности его толщины, приведенные в работах [4-7], на наш взгляд не достаточно наглядны. Принятая модель расчета трудно применима к реальным установкам МПЭ. В ней, в частности, предполагается, что при вращении подложки вокруг оси, нормальной к плоскости образца, точка пересечения оси молекулярного источника с подложкой и центр вращения совпадают, что ограничивает область применения модели.

В настоящей работе сделана попытка расчетным путем проследить закономерность влияния взаимного расположения молекулярного источника и подложки на неравномерность толщины растущего слоя.

1. Результаты

Расчет производился для установки МПЭ, предназначенной для выращивания слоев на основе $6aAs$ на подложке диаметром 40 мм. Фиксированными параметрами были диаметр цилиндрического тигля и расстояние от апертуры тигля до оси вращения образца (рис.1). Расчет коэффициента неравномерности производился на основании диаграммы направленности.

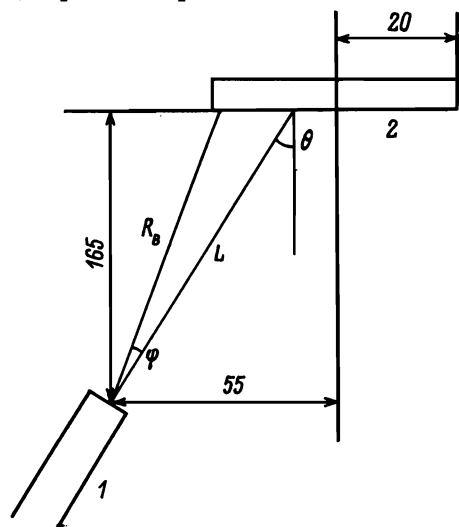


Рис.1. Расчетная геометрия "тигель - подложка": 1 - источник, 2 - подложка

1.1. Диаграмма направленности

Расчет диаграммы направленности для цилиндрического источника производился при следующих допущениях: молекулярный источник - кнуденовский; молекулы представляют собой идентичные точечные массы; силами взаимодействия между молекулами можно пренебречь; распределение молекул по скоростям - максвелловское; газ изотропен; число молекул, испускаемых за единицу времени с единичной площади при давлении P , равно:

$$S = \frac{n \bar{v}}{4} = \frac{P}{m} \sqrt{\frac{\mu}{2\pi RT}}, \quad (1)$$

где n - концентрация молекул; m - масса молекулы; μ - молекулярная масса; \bar{v} - средняя скорость молекул газа, T - абсолютная температура; R - универсальная газовая постоянная.

Если концентрация в тигле (n_1) и вне тигля (n_2) различна и $n_1 > n_2$, то концентрация испускаемых молекул с площади сечения тигля πr^2 :

$$N = \frac{n_1 - n_2}{4} \pi r^2 = \frac{P_1 - P_2}{m} \pi r^2 \sqrt{\frac{\mu}{2kRT}}, \quad (2)$$

где r - радиус тигля.

Исходя из того, что молекулярный источник находится в сверхвысоком вакууме, предполагаем $P_2 = 0$ и $P_1 \equiv P$.

Из уравнения (2) можно получить выражение для интенсивности потока частиц в единицу времени с площади πr^2 для кнудсеновского источника:

$$I = 1,118 \cdot 10^{22} \cdot \frac{\pi r^2}{L^2} \cdot \frac{P(T)}{\sqrt{\mu T}} \cos \theta, \quad (3)$$

где θ - угол между осью вращения образца и осью источника; L - расстояние от образца до источника по оси источника.

Эмпирическая формула зависимости давления от температуры имеет вид [8]:

$$\log P(T) = \frac{A}{T} + B \log T - C, \quad (4)$$

где A , B и C - константы, специфические для различных элементов. Так, для Ga выражение (4) принимает вид [8]:

$$P(T) = 10^{\left(-\frac{11021,9}{T} + 7 \log T - 15,42\right)}. \quad (5)$$

Следует также учесть, что при разном коэффициенте опустошения тигля κ (определяемом как отношение разности полного и истинного заполнения тигля ℓ к диаметру тигля d) форма диаграммы направленности изменяется. Для того, чтобы учесть эти изменения, вводится специальный коэффициент $C(\ell/d, \theta)$ и выражение (3) заменяется на следующее:

$$I = 1,118 \cdot 10^{22} \frac{\pi r^2}{L^2} \frac{P(T)}{\sqrt{\mu T}} \cos \theta \cdot C(\ell/d, \theta), \quad (6)$$

где $C(\ell/d, \theta)$ определяется как [9]

$$C(\ell/d, \theta) = \begin{cases} 1 - \frac{2}{\pi} (1 - \alpha) \left(\arcsin \alpha + \alpha \sqrt{1 - \alpha^2} + \frac{4}{3\pi\alpha} (1 - 2\alpha)(1 - (1 - \alpha)^{3/2}) \right) & \text{при } \alpha \leq 1; \\ \alpha + \frac{4(1 - 2\alpha)}{3\pi\alpha} & \text{при } \alpha \geq 1, \end{cases}$$

где

$$\alpha = \frac{\ell \cdot \operatorname{tg} \theta}{d}; \quad \alpha = \frac{\sqrt{\ell^2 + d^2} - \ell}{d + \frac{d^2}{\sqrt{\ell^2 + d^2}}}.$$

1.2. Неравномерность по поверхности подложки

В случае выращивания соединений A^3B^5 методом МПЭ было показано [10], что стехиометрия растущего слоя поддерживается сама собой, если интенсивность потока элементов У группы превосходит поток элементов III группы. Для $GaAs$ это означает, что коэффициент прилипания Ga (определяемый как отношение числа атомов, встроившихся в растущий слой, к числу атомов в падающем потоке) для не слишком высоких температур ($\sim 800^\circ C$) всегда равен 1, а коэффициент прилипания As зависит от заселенности поверхности атомами Ga и может быть равен 0 при отсутствии Ga на поверхности, либо близок к 1 при отсутствии на поверхности атомов As .

Для вычисления неравномерности толщины выращиваемого слоя была принята следующая модель роста:

рост происходит при достаточно высоких температурах (больших температуры неконгруэнтного испарения As);

температура галлиевого источника равна 1236 К;

рост производится в As -стабилизированном режиме;

в растущем слое отсутствуют структурные дефекты;

неравномерность толщины выращиваемого слоя по поверхности подложки не должна превышать 1%.

Расчётная геометрия "тигель Ga - подложка" приведена на рис.1. Для этого случая выражение (6) преобразуется в

$$I_B = I \cos \varphi \cdot \cos(\varphi + \theta) \left(L / R_B \right)^2, \quad (7)$$

где I_B - интенсивность потока частиц в рассматриваемой точке образца или, переходя к терминам массы Ga , осаждаемой на подложке, можно записать

$$M = \frac{\mu}{N_A} \cdot I_A, \quad (8)$$

где N_A - число Авогадро.

Очевидно, что осаждаемая в единицу времени на единицу площади масса с точностью до постоянного размерного коэффициента, представляет собой толщину выращиваемой пленки, и в связи с этим расчет велся для коэффициента неравномерности по осаждаемой массе (в дальнейшем - просто коэффициент неравномерности), который определялся как

$$\gamma = \frac{M_{max} - M_{min}}{M_{max}} \cdot 100\%, \quad (9)$$

где M_{max} и M_{min} - максимальная и минимальная осаждаемая масса.

Расчет закономерностей поведения коэффициента неравномерности производился в модели, предполагающей, что угол θ (рис.1) в геометрии "тигель - подложка", изменялся таким образом, что точка пересечения оси тигля с подложкой перемещалась от одного края образца до другого с заданным шагом. Результаты расчета для некоторых углов приведены на рис.2.

Для выбора оптимальной геометрии были рассчитаны также следующие зависимости:

а) функции коэффициента неравномерности γ от угла θ при различных коэффициентах опустошения (рис.3);

б) зависимость величины участка диаметра подложки x , на которой коэффициент неравномерности не превышает 1% (рис.4);

в) коэффициент неравномерности с учетом вращения подложки как функция от угла θ (рис.5).

2. Обсуждение результатов

Результаты расчетов показывают характер поведения неравномерности растущего слоя, исходя из которого может быть выбрано конкретное взаимное расположение источников и подложки, удовлетворяющее требуемому коэффициенту неравномерности.

Рис.2 показывает, что при увеличении угла θ происходит расширение области подложки, на которой неравномерность осаждаемой массы не превосходит заданной величины. Это свидетельствует о том, что при работе с невращающейся подложкой следует работать при углах θ , больших 20° .

Учет изменения заполнения тигля (рис.3) подтверждает, что наименьший коэффициент неравномерности находится в интервале углов θ от 20 до 25° .

Изменение вида рельефа растущего слоя при увеличении степени опустошения тигля в зависимости от угла θ , демонстрируемое кривыми 1-4 рис.4, показывает, что наибольшая зона минимальной неравномерности в отсутствии вращения может быть достигнута в диапазоне θ от 23 до 24° .

Кривые на рис.4 показывают, что получение коэффициента неравномерности $\sim 1\%$ на подложках диаметром более 20 мм весьма затруднительно. Однако, как известно,

это обстоятельство обходится введением вращения образца.

Анализ приведенных на рис.2 характеристик приводит к выводу, что уменьшение угла θ менее 15° вызывает приближение характера распределения потока осаждаемой массы к линейному закону, а это, в свою очередь, за счет усреднения при вращении подложки приводит к снижению неравномерности толщины растущего слоя.

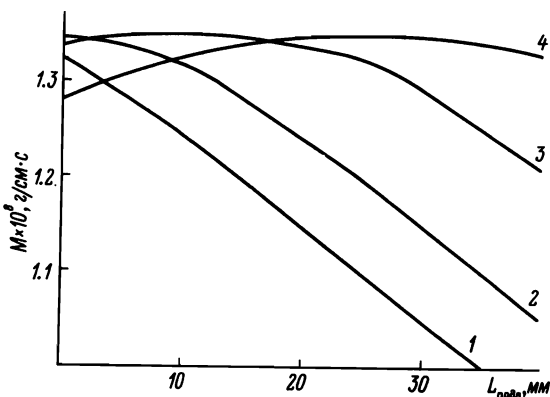


Рис.2. Рельефы осаждаемых масс. 1 - $\theta = 12,5^\circ$, 2 - $\theta = 15,5^\circ$, 3 - $\theta = 20,5^\circ$, 4 - $\theta = 25,5^\circ$

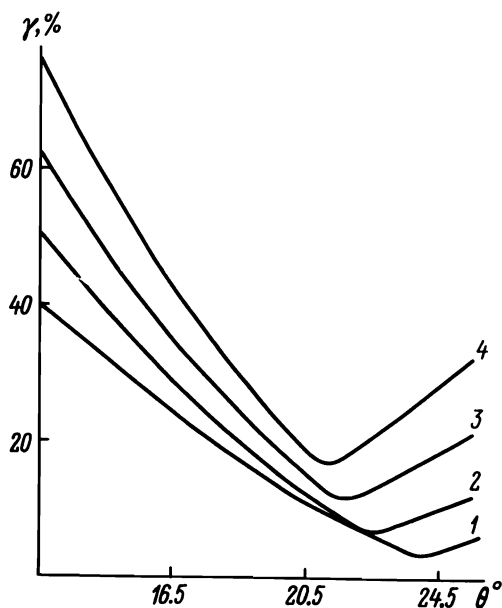


Рис.3. Зависимости коэффициента неравномерности γ от угла к оси подложки θ при различных коэффициентах опустошения тигля. 1 - $\kappa = 0$, 2 - $\kappa = 0,5$, 3 - $\kappa = 1$, 4 - $\kappa = 1,5$

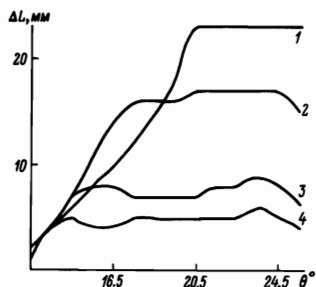


Рис.4. Зависимости величины участка диаметра x , на которой $\gamma \leq 1\%$ от угла θ . Позиции аналогичны рис.3

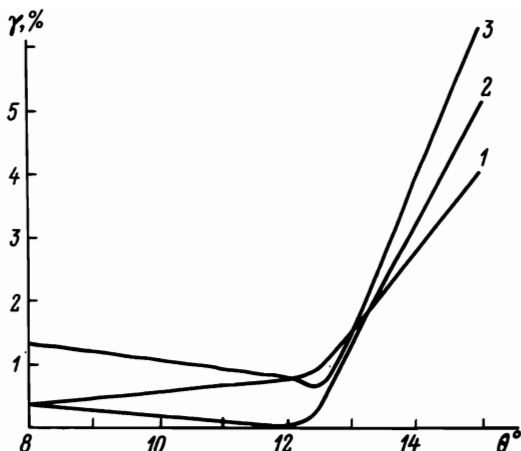


Рис.5. Зависимости коэффициента неравномерности γ от угла θ при вращении подложки при различных коэффициентах опустошения тигля: 1 - $\kappa = 0,5$, 2 - $\kappa = 1$, 3 - $\kappa = 1,5$

Можно показать, что подобный эффект достигается также при увеличении угла θ более 45° [7], однако сопровождается резким падением коэффициента использования расходуемых материалов и увеличивает нестабильность скорости роста.

Учет вращения приводит к выводу, что, начиная с углов $12,5^\circ$ и меньше, неравномерность растущего слоя не превышает 1% при реальных коэффициентах опустошения (рис.5). Однако, исходя из требований увеличения коэффициента использования расходуемых материалов угол $12,5^\circ$ является оптимальным для случая вращающейся подложки.

ЛИТЕРАТУРА

1. Комаки С., Косиба С.// Дэнси дзайрё, 1987, прил.ж № 11, 1986, С.65.
2. Исида Т.//Дэнси Дзайрё, 1986, прил.к № 11, 1985, С.72.
3. Cho A.Y., Cheng K.Y.//Appl.Phys.Lett.1981.V.38. N 5. P. 360.
4. Лембра Р.Я., Сиймон Х.В.//Уч.зап.Тартуского ун-та. 1982, вып.592, С.35.
5. Лембра Р.Я., Сиймон Х.В.//Уч.зап.Тартуского ун-та. 1983, вып.632, С.112.
6. Лембра Р.Я., Сиймон Х.В.//Уч.зап.Тартуского ун-та. 1983, вып.655, С.138.
7. Лембра Р.Я.//Поверхность. 1985. № 9. С.81.
8. Luscher P.E.,Collins D.M.//Prog.Cristal Growth Charct. 1979.V.2.N 1.P.15.
9. Чермак М.А.//Vacuum.1982.V.32. N 9.P.555.
- 10.Cho A.Y., Arthur J.R.//Prog.Solid State Chem. 1975. V.10. N 3. P.157.