

УДК 621.382-181.4.774.002.5

Статистическая модель роста $GaAs$ в методе молекулярно-пучковой эпитаксии.
Майоров А.А., Филаретов А.Г., Цырлин Г.Э. // Научное приборостроение. Автоматизация научных исследований. Л.: Наука, 1988, с. 98

Приведена модель роста в методе молекулярно-пучковой эпитаксии. Проведены расчеты, определяющие процесс роста в случае использования As_2 на кристаллографическом направлении $[100]$. Приведены зависимости послойных концентраций при температурах подложек от 600 до 900 К, а также при разных отношениях потоков мышьяка и галлия. Лит. - 8 назв., ил. - 4.

СТАТИСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РОСТА $GaAs$ В МЕТОДЕ МОЛЕКУЛЯРНО-ПУЧКОВОЙ ЭПИТАКСИИ

Введение

В последнее десятилетие возросло число работ, в которых методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) соединений $A^{III}B^V$ создаются полупроводниковые приборы, работа которых основана на квантово-размерных эффектах. Несмотря на успешное развитие технологии МПЭ, в самом развитии метода намечилось некоторое отставание в объяснении экспериментально полученных закономерностей роста эпитаксиальных слоев. Тем самым остается недостаточно ясным влияние на электрофизические свойства выращиваемых слоев приборных эффектов, первостепенными среди которых являются такие, как поведение точечных дефектов, влияние их концентрации на шероховатость интерфейса, а также анализ процессов роста на уровне нескольких монослоев [1].

Несмотря на то, что в аналитическом виде задача эпитаксиального роста не поддается решению, она может быть решена с помощью достаточно точного статистического анализа механизма встраивания частиц при случайном расположении дефектов и учете возможных факторов, влияющих на движение частиц по поверхности кристалла (температура подложки T_s , соотношение потоков частиц шихтовых материалов, кристаллография поверхности). Теоретическая проработка задач эпитаксиального роста представляется важной по нескольким причинам. Во-первых, эксперимент, связанный с реализацией поставленных выше задач, в методе МПЭ весьма сложен и дорог. Во-вторых, теоретическая проработка может помочь поиску оптимальных режимов эпитаксиального роста. Кроме того, заданием различных начальных условий моделирования (концентрации точечных дефектов) можно выявить критические условия роста эпитаксиальных слоев и исследовать процессы, позволяющие снизить влияние точечных дефектов на шероховатость слоя. По указанным причинам теоретические исследования процессов роста могут оказаться полезными как для разработчиков систем МПЭ, так и для экспериментаторов.

Моделирование процессов МПЭ роста $GaAs$ методом Монте-Карло проводилось в работах [2, 3], однако, использованная модель описана слишком кратко, чтобы ее можно было сравнить с моделью, предлагаемой в данной работе. Кроме того, в работе [2] были приняты начальные условия, не являющиеся типичными для технологии МПЭ (например, концентрация дефектов в начальном слое $\sim 5\%$ от общей концентрации матричных элементов), а в работе [3] рассматривались лишь общие механизмы встраивания As -компонента. Необходимо также отметить, что результаты моделирования в этих работах не сопоставлялись с экспериментальными данными.

В данной работе сделана попытка моделирования процессов роста $GaAs$ с помощью статистических методов на кристаллографическом направлении [100] на уровне нескольких монослоев при типичных в методе МПЭ температурах подложки с использованием кинетических уравнений.

Модель роста $GaAs$ основана на положениях, согласно которым элементы III и V групп в газовой фазе могут быть атомными или молекулярными. В рамках данной модели молекулы мышьяка представлялись двухатомными. Выбор кристаллографического направления $[100]$ обусловлен как наиболее широким его применением, так и относительной простотой модельных представлений о нем.

Выборенное направление представляет собой чередующиеся слои Ga и As таким образом, что на поверхность выходят либо атомы галлия, либо мышьяка, каждый из которых образует по две связи с нижним и верхним слоями. Следовательно, для того, чтобы атом Ga встроился в растущий слой, ему необходимо образовать две связи с предыдущим слоем мышьяка, что возможно при отсутствии в данном месте точечных дефектов. При высоких температурах атомы Ga мигрируют до тех пор, пока такое место не будет найдено.

Более сложный механизм встраивания относится к молекуле As_2 . Вначале молекула мышьяка физически адсорбируется на поверхности и приобретает высокоподвижное состояние; встраивание происходит после диссоциации на атомы при наличии двух вакансий. В работе [4] предложено описать этот процесс следующим образом



где As_2 - молекула в газовой фазе; As_2^* - физически адсорбированное состояние; V_{As} - вакансия мышьяка и As - хемисорбированный атом.

Для $[100]$ это означает, что для того, чтобы молекула As_2 диссоциировала, необходимы три последовательных атома Ga вдоль выбранного направления в предыдущем слое.

Природу роста определяют кинетические процессы, происходящие на поверхности. При этом выражения для скорости десорбции и диффузии выглядят соответственно как

$$\begin{aligned} DES &= DES_0 \exp\left(-\frac{E}{kT_s}\right), \\ DIF &= DIF_0 \exp\left(\frac{-E + E_B}{kT_s}\right), \end{aligned} \quad (2)$$

где E - энергия связи атома в данном месте; E_B - параметр, определяющий энергетический барьер перехода в соседнее состояние; k - постоянная Больцмана; T_s - температура подложки.

Энергетическими параметрами в модели роста были приняты следующие значения энергий связи: для равноименных атомов 1 эВ, для одноименных - 0,2 эВ [2]. Величина энергетического барьера для диффузии составляла 0,58 эВ. Значения предэкспоненциальных факторов были: для десорбции $1 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1}$, для диффузии - $5 \cdot 10^7 \text{ с}^{-1}$.

В модели роста предполагалось, что градиент распределения потоков частиц, поступающих на поверхность, равен нулю. Также предполагалось, что коэффициенты прилипания As на As и Ga на Ga равны 0. Начальные координаты каждой частицы на подложке определялись путем двукратного обращения к генератору случайных чисел. Выбор соответствующих длин диффузии и энергетических уравнений определялся из соображений роста $GaAs$ [5] с привлечением SOS-модели [6]. При этом процесс диффузии предполагался возможным на ближайшее место, определяемое случай-

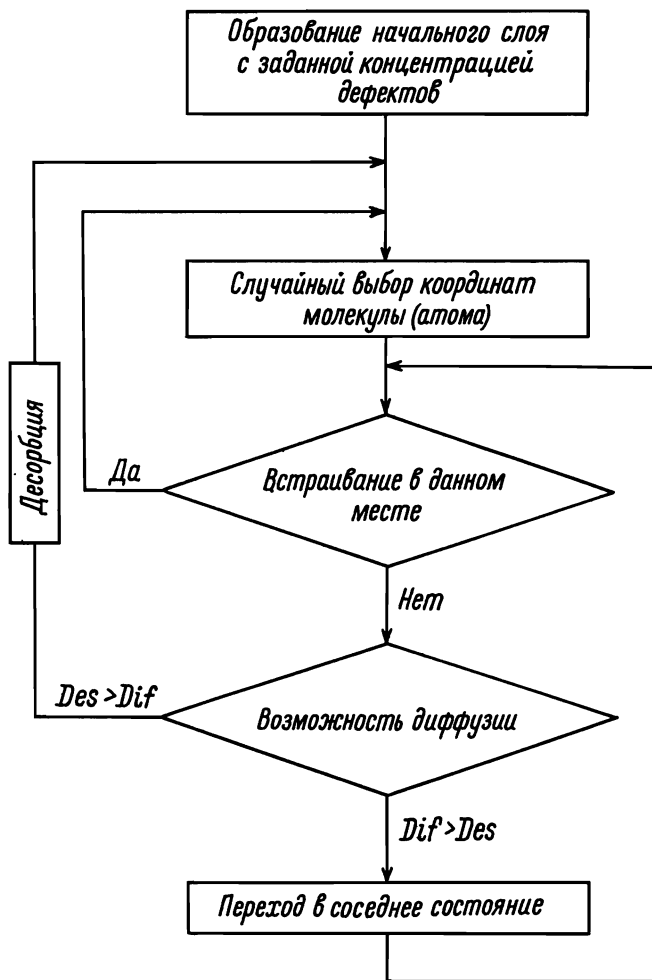


Рис.1. Функциональная схема модели

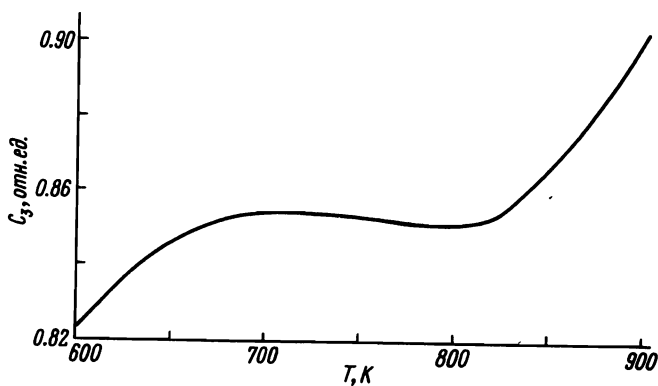


Рис.2. Температурная зависимость коэффициента покрытия третьего слоя

ным образом, с последующим изменением энергетике системы. Вероятность процессов диффузии или десорбции определялась на основе уравнений (2) за характерное время процесса МПЭ роста, которое определяется скоростью роста (в данном случае была принята наиболее типичная для МПЭ скорость роста Γ монослой в секунду).

Расчеты проводились на матрице размером 40×40 элементарных ячеек. Функциональная схема моделируемых процессов приведена на рис.1.

Результаты

Первым этапом расчетов была проверка на стабильность результатов моделирования. Критерием стабильности был выбран коэффициент стабильности, равный отношению разности максимальной и минимальной концентрации вакансий в третьем слое к максимальному значению в серии из пяти аналогичных расчетов. Он оказался равен 0,009, что в рамках предлагаемой модели вполне соответствует естественной случайности статистических методов и возможностям воспроизводимости слоев в методе МПЭ.

Исходя из того, что требование стабильности получаемых результатов было выполнено, были проведены дальнейшие исследования. На рис.2 приведена температурная зависимость концентрации вакансий в третьем (втором мышьяковом) слое. При этом предполагалось, что концентрация точечных дефектов на слое $G\alpha$, определяющем начальные условия роста, невелики, и составляла менее 0,1 % от концентрации атомов в слое. Следует также отметить, что температуры, характерные для метода МПЭ, обычно лежат в диапазоне от 750 до 900 K; продолжение зависимости в область более низких температур приведено как для более полного представления о температурной зависимости, так и в связи с естественным стремлением экспериментаторов снизить различным способом температуру подложки [7].

С целью более полного представления о параметрах, влияющих на рост структуры, были проведены расчеты для различных соотношений потоков мышьяка и галлия (рис.3).

Анализ результатов позволяет заключить, что покрытие слоя есть функция от нескольких параметров, изменение которых на различных участках приводит к неоднозначным решениям. Как видно из рис.2 в диапазоне температур от 650 до 800 K концентрация вакансий в третьем слое практически постоянна, что указывает на наличие определенной устойчивой переходной области от низко- к высокотемпературному режиму. Более низкая концентрация занятых состояний при низких температурах может быть объяснена таким образом: в этом случае атомы $G\alpha$ в предыдущем слое располагаются в большей степени случайно, и поэтому количество разрешенных состояний для встраивания атомов As невелико. Напротив, при высоких температурах, анализ растущей поверхности галлиевого слоя указывает на наличие протяженных двумерных кластеров, что приводит к более высокой концентрации подобных разрешенных состояний и, следовательно, к увеличению вероятности адсорбции мышьяка. Соотношение потоков мышьяка и галлия также оказывает влияние на шероховатость поверхности. Увеличение отношения J_{As_2}/J_{Ga} (рис.3) однозначно приводит к увеличению концентрации занятых состояний в слоях, однако при соотношениях потоков ~ 2 происходит стабилизация послойной концентрации в зависимости от этого отношения. Кроме того, анализ района точечных дефектов показывает, что при достаточно высоких отношениях ($J_{As_2}/J_{Ga} > 1,5$) разрастание точечных дефектов не происходит, в то время как при $J_{As_2}/J_{Ga} \sim 1$ характер их поведения является статистическим, то есть при определенных условиях присутствие в начальном слое точечных

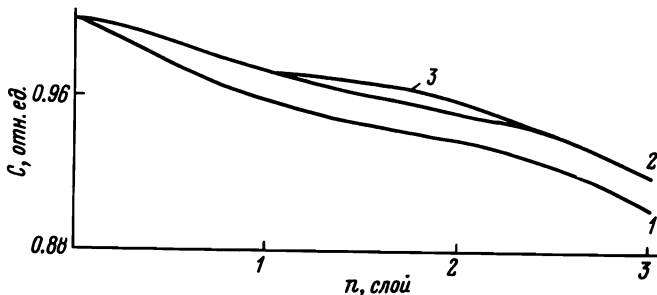


Рис.3. Послойная концентрация:
 1 - $J_{As_2} / J_{Ga} = 1$; 2 - $J_{As_2} / J_{Ga} = 2$;
 3 - $J_{As_2} / J_{Ga} = 3$

дефектов может привести к существенной разупорядоченности в последующих слоях вследствие наличия подобных дефектов.

Влияние соотношений потоков мышьяка и галлия на шероховатость поверхности эпитаксиальной пленки указывает как на необходимость поддержания с высокой точностью температуры источников и галлия, и мышьяка, так и на необходимость учета при конструировании ростовых систем требования правильного распределения J_{As_2}/J_{Ga} по поверхности образца.

Заключение

Необходимо отметить, что данная модель не претендует на абсолютное количественное воспроизведение процессов роста; она призвана лишь предложить определенные технологические рекомендации как для изготовителей установок МПЭ, так и для экспериментаторов. Тем не менее, основные параметры роста и происходящие при этом процессы в целом подтверждаются экспериментальными данными. Так, в качестве проверки правильности предложенной модели, было проведено сравнение с экспериментальными данными приведенными в работе [8] (рис.4), которое показало хорошее

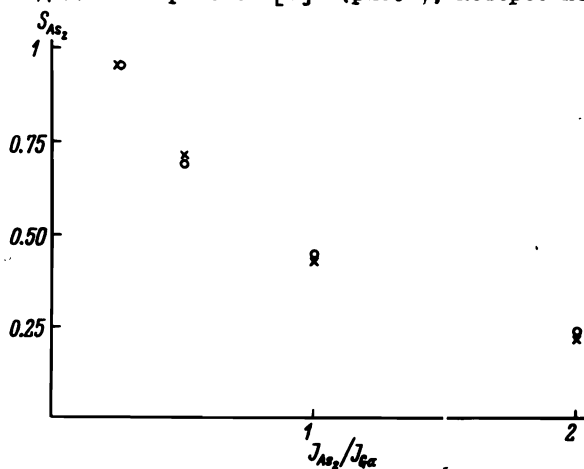


Рис.4. Зависимость коэффициента прилипания S_{As_2} от соотношения потоков J_{As_2}/J_{Ga} при $T_s = 600$ К: данные эксперимента (o) и теории (x)

соответствие теории и эксперимента. Кроме того, создание таких структур, как НЭМТ-транзисторы или акусто-электронные приборы приводит к необходимости тщательного изучения природы шероховатости поверхности при росте в несколько монослоев, что, как было показано, возможно с помощью методов математического моделирования.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ando T.//J.Phys.Soc.of Japan.V1982.V.51.P. 3900.
2. Singh J.,Madhukar A.//J.Vac.Aci.Technol.B. (1983).V.1.P.305.
3. Singa J.,Bajaj K.K.//J.Vac.Sci.Technol.B. (1984).V.2.P.276.
4. Arthur J.R.//Surf.Sci. (1974).V.43.P. 449.
5. Nagata S., Tanaka T.//J.Appl.Phys. (1977).V.48. P.940.
6. Gilmer H., Bennema P.//J.Appl.Phys. (1972).V.43.P.1347.
7. Shimizu S., Tsukakoshi O., Komiya S., Makita Y.//J.Vac. Sci.Technol. B. 1985.У.3. P. 554.
8. Foxon C.T., Jogee B.A.//Surf.Sci. (1977). V. 64. P. 293.