

УДК 621 . 315 . 592

Динамика роста бинарных полупроводниковых соединений A_3B_5 в методе молекулярно-пучковой эпитаксии: Компьютерное моделирование / А.Г. Филаретов, А.А. Майоров, Г.Э. Цырлин // Научное приборостроение. — 1992. — Т.2. — N 4: Поверхность и методы ее исследования. — С.68—73.

С помощью компьютерного моделирования проведено исследование временных зависимостей плотности моноатомных ступеней на поверхности, а также средней высоты и шероховатости на примере автоэпитаксиальных GaAs и AlAs для различных соотношений потоков и температур подложки. Библ. 8 назв. Ил. 4.

А. Г. Филаретов
(НПО "Авангард", Санкт-Петербург)

А. А. Майоров, Г. Э. Цырлин
(Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург)

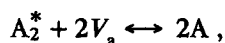
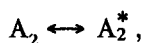
ДИНАМИКА РОСТА БИНАРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ A_3B_5 В МЕТОДЕ МОЛЕКУЛЯРНО - ПУЧКОВОЙ ЭПИТАКСИИ

Компьютерное моделирование

A Monte Carlo technique is applied to simulate the MBE growth of 111-V semiconductor compounds on the (100) vicinal surfaces. To characterize the growth dynamics the disorder parameter and surface roughness were used. The correlation between the disorder parameter and RHEED intensity is shown. The dynamic parameters are applied to investigate the growth conditions influence on the growth front formation of GaAs and AlAs as an example of A_3B_5 semiconductors. It is shown that the model proposed can be used for MBE growth procedures optimization.

В настоящее время метод молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) является одной из наиболее прогрессивных технологий в области создания полупроводниковых приборов на основе соединений A_3B_5 для микро- и оптоэлектроники. Актуальным представляется получение грани раздела полупроводников различного состава с заданными оптическими и электрофизическими свойствами, на которые непосредственное влияние оказывают условия роста [1]. Детальное исследование этой задачи экспериментальным путем осложнено в силу необходимости проведения большого числа экспериментов и вероятности влияния послеростовых операций, в связи с чем возникает необходимость создания математических моделей МПЭ-роста с предусмотренной возможностью изменения параметров, определяющих технологические режимы выращивания пленок.

В настоящей работе на основании ранее предложенной компьютерной модели роста полупроводниковых соединений A_3B_5 методом молекулярно-пучковой эпитаксии из пучков димеров анионов и атомарных катионов [2] проводится исследование динамики роста поверхности (100) на примере GaAs и AlAs. Молекула аниона представлялась участвующей в следующих процессах на поверхности [3]:



где A_2 — молекула в газовой фазе, A_2^* — физически адсорбированное состояние, V_a — вакансия аниона, A — хемисорбированное состояние. Считалось,

что процесс диссоциативной хемисорбции активируется последовательностью из трех атомов катионов в предыдущем слое, условием хемисорбции катиона является наличие в рассматриваемой области кристалла двух свободных связей у соседних анионов в нижнем слое.

Как и прежде, для описания энергетики системы "атом—окружение" мы использовали функции Гамильтона, записанные для катионов и анионов в хемисорбированном состоянии соответственно в виде

$$H_c = -(E_1 \int z(\mathbf{R}) \delta(|\mathbf{R}| - a \frac{\sqrt{2}}{4}) d\mathbf{R} + E_2 \int z(\mathbf{R}) \delta(|\mathbf{R}| - a \frac{\sqrt{2}}{2}) d\mathbf{R}), \quad (1)$$

$$H_a = -(E_1 \int z(\mathbf{R}) \delta(|\mathbf{R}| - a \frac{\sqrt{2}}{4}) d\mathbf{R} + E_3 \int z(\mathbf{R}) \delta(|\mathbf{R}| - a \frac{\sqrt{2}}{2}) d\mathbf{R}). \quad (2)$$

Здесь E_1 — энергия связи анион-катион, E_2 и E_3 — энергии связи катион-катион и анион-анион соответственно, $z(\mathbf{R})$ — функция, отличная от нуля лишь в занятых узлах решетки и равная в них 1, a — постоянная решетки. Аргументы δ -функций соответствовали расстояниям между ближайшими и вторыми соседями. За нулевой уровень энергии принималась энергия взаимодействия бесконечно удаленной частицы с поверхностью кристалла.

Кинетика поверхностных реакций описывалась для скоростей десорбции и поверхностной миграции следующими уравнениями:

$$D = D_0 \exp(-E/kT_s),$$

$$R = R_0 \exp(-(E - E_d)/kT_s), \quad (3)$$

где D_0 и R_0 — предэкспоненциальные факторы, E — энергия связи в данном месте (1,2), E_d — аквационный барьер поверхностной миграции, определяемый обрывом половины поверхностных связей на регулярной поверхности, k — постоянная Больцмана, T_s — температура подложки.

При моделировании были использованы следующие значения констант [2]: для GaAs $D_0 = 1,2 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$, $R_0 = 3,2 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$, $E_1 = 1,0 \text{ эВ}$, $E_2 = E_3 = 0,1 \text{ эВ}$; для AlAs $D_0 = 3 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$, $R_0 = 1 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$, $E_1 = 1,4 \text{ эВ}$, $E_2 = E_3 = 0,14 \text{ эВ}$. Динамические характеристики изучались для вицинальной поверхности (100), разориентированной на $0,95^\circ$ по направлению к (110) (ширина террас составляет 120 \AA) при скорости роста один монослой в секунду и различных соотношениях потоков I_{As_2}/I_{Ga} (I_{As_2}/I_{Al}).

Рассчитан параметр разупорядоченности $S(t)$, представляющий собой плотность моноатомных ступеней на поверхности

$$S(t) = \sum_i \sum_j \delta_{ij}(t) / N.$$

Здесь $\delta_{ij}(t)$ — функция, равная 1 в случае отсутствия в направлении, параллельном краю террасы в соседнем для поверхностного катиона месте, адатома

и 0 — в случае его присутствия в этом месте, N — число мест в одном слое, t — время.

На рис. 1 приведены типичные зависимости $S(t)$ для GaAs, которые сравниваются с экспериментальными данными по росту GaAs на вицинальных гранях при ширине террас 72 \AA [4]. Из рисунка видно, что характер изменения зависимостей $S(t)$ и интенсивности дифракции быстрых электронов на отражение ($I_{\text{ДБЭО}}$) с ростом температуры одинаков. Существует температурный интервал, в котором экспериментальные и рассчитанные кривые обладают осциллирующим характером, однако при некоторой критической температуре T_k осцилляции исчезают. Данные работы [4] дают величину $T_k \approx 865 \text{ K}$, а при расчете получено значение $T_k = 920 \text{ K}$. Указанное отличие можно объяснить, используя соотношение Эйнштейна (при отсутствии анизотропии)

$$x^2 = 2D\tau,$$

где x — расстояние между террасами, D — коэффициент диффузии, τ — средний интервал времени, через который атомы поступают на подложку. С учетом уравнения (3) отношение квадратов расстояний для эксперимента (x_1) и моделирования (x_2) будет равно

$$x_1^2 / x_2^2 = \exp \left[-\frac{E + E_d}{k} \left(\frac{T_{k2} - T_{k1}}{T_{k1} T_{k2}} \right) \right]. \quad (4)$$

Здесь T_{k1} и T_{k2} — критические температуры исчезновения осцилляций для эксперимента и моделирования соответственно. Подстановка значений этих температур дает величины 0,36 в левой части и 0,39 в правой части (4), что

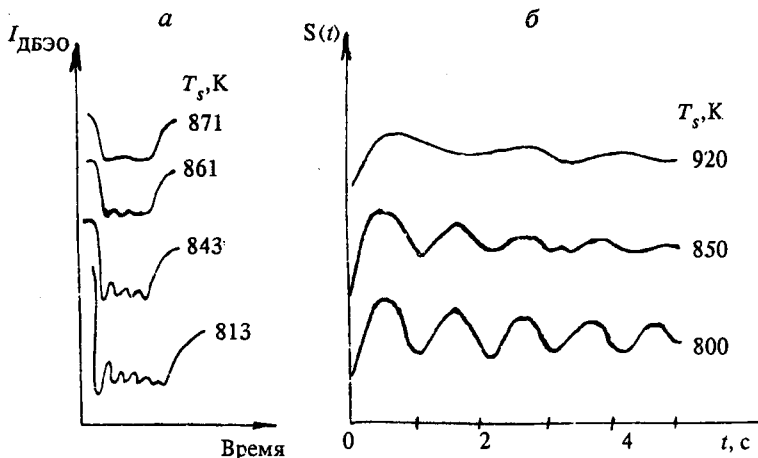


Рис. 1. Динамические характеристики фронта растущего кристалла для GaAs при $I_{\text{As}_2} / I_{\text{Ga}} = 3$.

а — экспериментальные данные по ДБЭО [4], б — данные компьютерного моделирования.

указывает на хорошее соответствие предлагаемой модели реальной картине роста.

Как видно из рис. 2 а, б, при повышении потока мышьяка (при неизменной величине интенсивности потока галлия) происходит восстановление осциллирующего характера $S(t)$ при тех же значениях T_s . Объяснение этого факта следует из данных работы [5], согласно которым в случае перехода от Ga-стабилизированного к As-стабилизированному росту уменьшается длина поверхностной миграции атомов Ga. В соответствии с этим переход к росту за счет нуклеации на ступенях требует повышенной температуры образца для стимулирования миграции.

Наличие перехода от осциллирующего к сглаженному характеру кривых можно объяснить изменением механизма нуклеации при повышении температуры подложки. Действительно, при низких температурах длина поверхностной миграции невелика и процесс роста идет в основном за счет зародышеобразования двумерных кластеров между ступенями. При повышении температуры растет длина поверхностной миграции и латеральный рост происходит по механизму нуклеации на террасах, что и приводит к исчезновению осцилляций. Подобный эффект наблюдается при росте более тугоплавких соединений в системе A_3B_5 (рис. 2, в). Сравнение кривых при одинаковых соотношениях потоков и температурах подложки (рис. 2, а и 2, в) показывает, что при T_{kGaAs} осцилляции для AlAs сохраняются. Это объясняется уменьшением эффективной длины поверхностной миграции для атомов Al вследствие того, что энергия связи атома Al в кристалле превышает аналогичную характеристику для Ga в 1,4 раза [6].

Нами рассчитана временная зависимость шероховатости

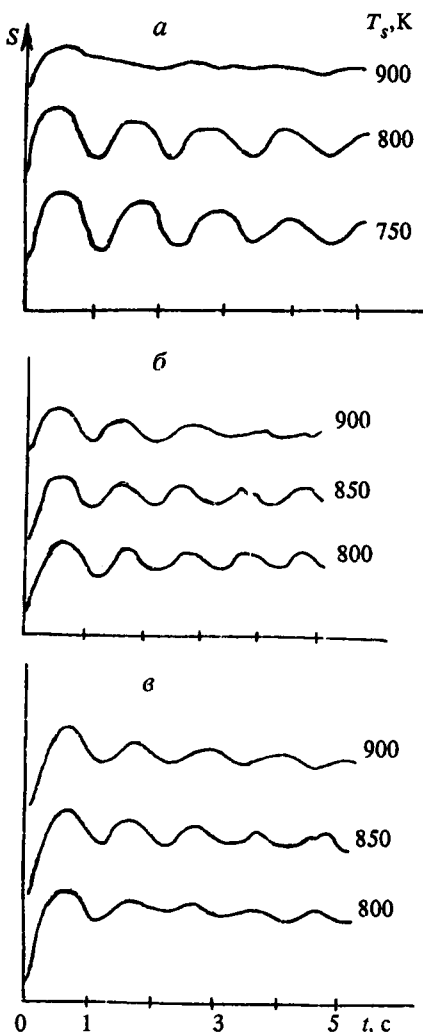


Рис. 2. Зависимости плотности моноатомных ступеней на поверхности $S(t)$ для различных соединений A_3B_5 .

а — GaAs, $I_{As_2}/I_{Ga} = 2$, б — GaAs, $I_{As_2}/I_{Ga} = 10$; в — AlAs, $I_{As_2}/I_{Ga} = 3$.

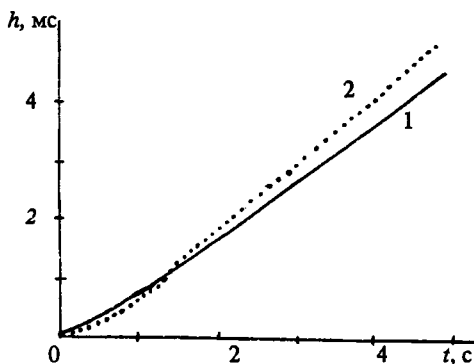


Рис. 3. Зависимость средней высоты растущего кристалла от времени роста.

1 — данные компьютерного моделирования для GaAs при $I_{As_2}/I_{Ga} = 3$ и $T_s = 850$ K, 2 — данные аналитической кривой полислоного роста.

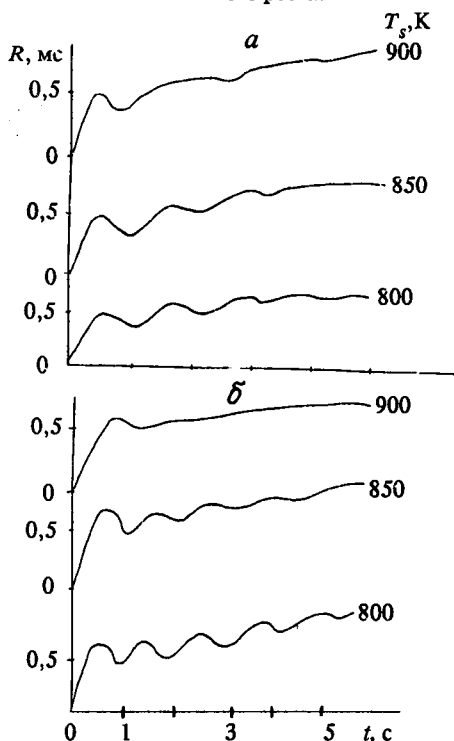


Рис. 4. Зависимости шероховатости поверхности от времени роста для GaAs. а — $I_{As_2}/I_{Ga} = 3$, б — $I_{As_2}/I_{Ga} = 10$.

$$R(t) = \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\bar{h}(T) - h_i(t))^2 \right)^{1/2},$$

где N — число элементарных ячеек в слое, i — номер элементарной ячейки, $\bar{h}(t)$ — средняя высота растущего кристалла, $h_i(t)$ — высота кристалла на i -ом месте. Типичная зависимость функции $\bar{h}(t)$ для GaAs при $T_s = 850$ K и соотношении потоков $I_{As_2}/I_{Ga} = 3$ (рис. 3) наблюдалась как в экспериментах [7], так и при решении аналитических выражений в рамках теории послойного роста [8]. Некоторый провал (кривая 1) в начале роста кристалла объясняется повышенной вероятностью десорбции с поверхности вследствие слабого латерального взаимодействия частиц при малых временах напыления.

На рис. 4 приведены зависимости шероховатости поверхности $R(t)$ при различных соотношениях потоков и температурах подложки. Как и в случае параметра разупорядоченности $S(t)$, временная зависимость шероховатости осциллирует с затуханием с тем же периодом, при этом асимптота $R(t) \sim t^{1/2}$. Из приведенных на рис. 4 зависимостей видно, что глубина модуляции осцилляций существенно зависит от условий роста кристалла, причем с ростом температуры подложки и соотношения потоков происходит сглаживание модуляции. При малых соотношениях потоков с повышением температуры происходит некоторое увеличение абсолютного значения шероховатости, а при высоких — некоторое его уменьшение, в то время как абсолютное значение шероховатости возрастает с ростом I_{As_2}/I_{Ga} при тех же температурах образца.

Таким образом, проведено исследование динамики роста полупроводниковых соединений A_3B_5 при разных условиях методом МПЭ. Использование полученных результа-

тов позволяет осуществлять предростовую оптимизацию технологических режимов выращивания слоев с заданными параметрами по ширине переходной области границ раздела полупроводников различного состава за и сократить собственно ростовую оптимизацию законченных структур — заготовок для приборов на основе современной арсенид-галлиевой технологии.

ЛИТЕРАТУРА

1. Weisbuch C., Dingle R., Petroff P.M. *e. a.* // *Appl. Phys. Lett.* — 1981. — V. 38, № 11. — P. 840—842.
2. Филаретов А. Г., Цырлин Г. Э. // *ФТТ.* — 1991. — Т. 33, № 5. — С. 1329—1336.
3. Arthur J. R. // *Surf. Sci.*—1974. — V. 43. — P. 449—461.
4. Neave J. H., Dobson P. J., Joyce B. A., Zhang J. // *Appl. Phys. Lett.* — 1985. — V. 47, № 2. — P. 100—102.
5. Nagata S., Tanaka T. // *J. Appl. Phys.* — 1977. — V. 48, № 3. — P. 940—942.
6. Ihm J., Joannopoulos J. D. // *J. Vac. Sci. Technol.* —1982. — V. 21, № 2. — P. 340—343.
7. Genkin V. M., Fraerman A. A. // *J. Cryst. Growth.* — 1988. — V. 89, № 2—3. — P. 357—359.
8. Cirlin G. E., Dubrovskiy V. G., Philaretov A. H. // *Abs. 2-nd International Conf. on Computational Physics. Amsterdam, 1990.* — P. 54.

Рукопись поступила 17.11.92