

ДИНАМИКА РОСТА ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ A_3B_5 В МЕТОДЕ МИГРАЦИОННО — СТИМУЛИРОВАННОЙ ЭПИТАКСИИ: КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

© 1996, Г.Э. Цырлин

Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург

Поступила в редакцию 22.03.96

С помощью компьютерного моделирования роста в методе миграционно — стимулированной эпитаксии получены временные зависимости средней высоты и шероховатости пленки GaAs при различных условиях роста. Показано, что функция средней высоты от времени является линейно-ступенчатой, а временные зависимости шероховатости обладают осциллирующим характером. Получено, что при оптимальных условиях роста возможно снижение величины шероховатости в 1.5 — 2 раза по отношению к методу молекулярно-пучковой эпитаксии.

Введение

Метод молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) позволяет контролируемо выращивать монокристаллические полупроводниковые соединения с шириной переходных слоев в единицы монослоев. Это позволило создать новый класс приборов, принцип действия которых основан на квантово-размерных эффектах. Существует, однако, и ряд недостатков, присущих этой технологии. Так, при выращивании структур с различными по составу полупроводниками, следует учитывать, что область границы раздела (например, GaAs/Al_xGa_{1-x}As) обладает большой плотностью моноатомных ступеней; кроме того, несмотря на то, что температура подложки, при которой происходит рост, существенно ниже, чем в других эпитаксиальных методиках (таких, как жидкофазная или газотранспортная эпитаксии), однако и этих температур достаточно, чтобы межслойной диффузией легирующих примесей можно было бы пренебречь. Таким образом, при использовании традиционной МПЭ затруднительно получить сверхрезкие границы раздела полупроводников различного состава и профиля легирования, что является важным при изготовлении структур с квантовыми ямами, квазиодномерными каналами и др. Для устранения перечисленных выше недостатков необходимо с одной стороны, стимулировать поверхностные кинетические процессы, а с другой — понизить температуру роста. Для этого используют временную приостановку роста путем перекрывания заслонки источника, определяющего рост (в системе A_3B_5 — элемента III группы) [1], применяют

источники с ионизацией элементов [2] и т.д. Однако в наибольшей степени для технологического решения задачи создания сверхрезких границ раздела подходит метод миграционно-стимулированной эпитаксии (МСЭ) [3], получивший свое развитие в последние несколько лет.

Вследствие сравнительно малого периода времени использования данной технологии, не на все вопросы, связанные с закономерностями эпитаксиального роста при МСЭ, был дан ответ. К ним, прежде всего, относятся такие, как: возможно ли получение гетероструктур с действительно атомногладкими границами раздела; что происходит при повышении температуры образца и будут ли при этом образовываться трехмерные островки роста [4]. Исследование процессов роста при МСЭ экспериментальным путем затруднено вследствие технических сложностей при эксплуатации сверхвысоковакуумного оборудования, используемого при МСЭ (например, из-за ограниченного количества срабатывания механизмов заслонок до их замены), поэтому важным представляется решение отдельных задач теоретически. Одним из инструментов, позволяющих проследить основные стадии роста, является статистическое моделирование процессов выращивания с использованием метода Монте-Карло.

В данной работе с помощью компьютерной модели роста бинарных полупроводниковых соединений A_3B_5 из потоков димеров анионов и атомарных катионов проведено исследование временных зависимостей средней высоты и шероховатости пленки на примере GaAs при различных условиях роста в методе миграционно-стимулированной эпитаксии.

Компьютерная модель МСЭ роста

При исследовании процессов роста GaAs при масочной МПЭ было обнаружено, что длина поверхностной миграции атомов Ga растет при переходе от As- к Ga-стабилизированным условиям роста [5]. Понимание того факта, что длина миграции Ga растет с уменьшением давления мышьяка, возможно и привело к созданию разновидности МПЭ — метода миграционно-стимулированной эпитаксии, принципиальное отличие которого заключается в последовательном (а не одновременном, как при МПЭ) характере направления молекулярных пучков элементов III и V групп на поверхность подложки.

Для описания процессов МСЭ-роста была использована компьютерная модель, предложенная в [6]. Основные положения модели заключались в следующем. Молекула мышьяка представлялась двухатомной, диссоциативная хемисорбция которой идет по двухступенчатому механизму [7]. Поток галлия считался атомарным; критерием хемисорбции атомов Ga было нахождение в собственной подрешетке и отсутствие в данном месте точечного дефекта при наличии двух свободных связей у соседних хемисорбированных атомов As в предыдущем атомном слое.

Энергетика системы “атом — окружение” определялась функцией Гамильтона:

$$H = - \left(E_{ac} \int z(\vec{R}) \delta \left(|\vec{R}| - a \frac{\sqrt{2}}{4} \right) d\vec{R} + E_{cc} \int z(\vec{R}) \delta \left(|\vec{R}| - a \frac{\sqrt{2}}{2} \right) d\vec{R} \right) \quad (1)$$

$$H = - \left(E_{ac} \int z(\vec{R}) \delta \left(|\vec{R}| - a \frac{\sqrt{2}}{4} \right) d\vec{R} + E_{aa} \int z(\vec{R}) \delta \left(|\vec{R}| - a \frac{\sqrt{2}}{2} \right) d\vec{R} \right) \quad (2)$$

где: a — постоянная решетки; E_{ac} — энергия связи ближайших соседей, соответственно; E_{cc} и E_{aa} — энергии связи катион-катион и анион-анион; $z(\vec{R})$ — функция, отличная от нуля лишь в занятых узлах решетки и равная в них единице. За нулевой уровень энергии принималась энергия взаимодействия бесконечно удаленной частицы с поверхностью кристалла; аргументы δ -функций соответствовали расстояниям между ближайшими и вторыми соседями в кристаллах со структурой цинковой обманки.

Скорости процессов реиспарения и поверхностной

миграции описывались соответственно в виде:

$$D = D_0 \exp(-E/kT_s) \quad (3)$$

$$R = R_0 \exp(-(E - E_d)/kT_s) \quad (4)$$

где: E — энергия связи частицы; E_d — параметр поверхностной миграции, определяемый обрывом половины связей на регулярной поверхности; D_0 и R_0 — постоянные процессов; k — постоянная Больцмана, T_s — температура подложки.

Константы в выражениях (1—4) рассчитывались на основании экспериментальных данных. При этом были получены следующие величины: $E_1 = 1.0$ эВ, $E_2 = 0.1$ эВ, $R_0 = 1.2 \cdot 10^{13}$ с⁻¹, $D_0 = 3.2 \cdot 10^9$ с⁻¹. Процесс моделирования был построен следующим образом: на поверхность осаждалось число атомов Ga в соответствии с требованиями заполнения монослоя (матрица содержала 30 x 30 узлов кристаллической решетки), далее следовало количество молекул As₂, равное произведению числа осажденных атомов Ga на величину задаваемого соотношения потоков. Предполагалось отсутствие примесных центров, дефектов типа “междоузлие”; сегрегацией одноименных частиц пренебрегалось. Градиенты распределения потоков по поверхности и температуры образца считались равными нулю. В рассмотрение принималась как послойная, так и межслойная миграция. Начальной для роста являлась As-стабилизированная поверхность GaAs (001), разориентированная по направлению к [011] на 0.95°. Скорость роста соответствовала напылению 1 монослоя за секунду.

Результаты и их обсуждение

Результаты моделирования представлялись в виде временных зависимостей средней высоты $\bar{H}(t)$ и шероховатости поверхности $\sigma(t)$, вычисляемой по формуле:

$$\sigma(t) = \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\bar{H}(t) - H_i(t))^2 \right)^{1/2} \quad (5)$$

где: N — количество элементарных ячеек в слое; $H_i(t)$ — высота слоя в данном месте i в момент времени t . Результаты усреднялись в серии из пяти независимых машинных экспериментов с одинаковыми условиями роста; стандартное отклонение средних значений определяемых величин не превосходило ± 2.5 %.

На рис.1 приведены типичные зависимости средней высоты от времени при различных соотношениях потоков J_{As}/J_{Ga} . Показано, что $\bar{H}(t)$ обладает линейно-ступенчатым характером (более наглядно демонстрируемый зависимостью $\bar{H}(t)/dt$), проявляю-

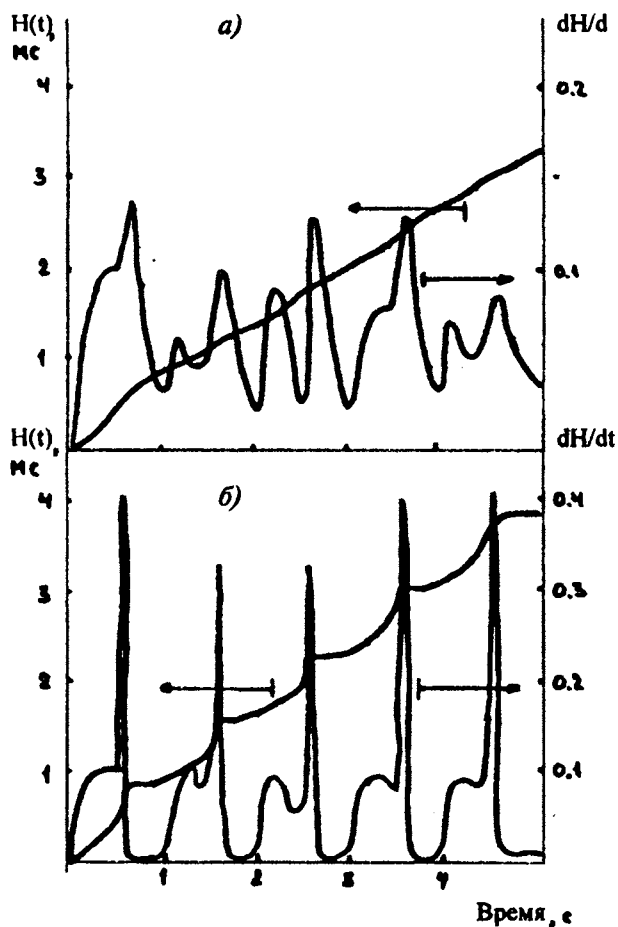


Рис.1. Временные зависимости средней высоты и производной средней высоты по времени для температуры подложки 700К

а) соотношение потоков мышьяка и галлия 1,
 б) соотношение потоков мышьяка и галлия 10.

шийся более ярко при повышении величины J_{As}/J_{Ga} . Данный характер не наблюдался в методе МПЭ, где характерной зависимость $H(t)$ была линейной, начиная с некоторого момента времени t [8], определяемого температурой подложки и соотношением потоков элементов V и III групп. Ступенчатый ход зависимости может быть объяснен характером направления потоков на поверхность подложки при МСЭ-росте. Действительно, при открытии заслонки источника с галлием, происходит равномерное напыление Ga на подлежащий слой As, исключая этап начала роста монослоя. На данном временном интервале плотность адатомов невелика и латеральное взаимодействие между поверхностными атомами Ga практически отсутствует. После дальнейшего напыления (степень покрытия после ~ 0.1 монослоя) подобным взаимодействием пренебречь уже нельзя, и на поверхности образуются квазистабильные двумерные кластеры. При этом рост происходит за

счет присоединения атомов в образовавшиеся зародыши, а десорбция практически отсутствует. Это приводит к линейному участку на зависимости $H(t)$ вплоть до закрытия заслонки галлиевого источника и открытия заслонки источника As. Так как мышьяк является двухатомным, при условии полной хемисорбции диссоциированных молекул скорость заполнения мышьяковой подрешетки в два раза выше, чем для Ga уже начиная с $J_{As}/J_{Ga} = 1$ (вследствие десорбции эта скорость может быть несколько ниже). Тем самым на зависимости $H(t)$ появляется участок более резкого возрастания средней высоты. Естественно, что повышение соотношения потоков приведет к приближению формы функции $H(t)$ к ступенчатой. Наличие участка независимости средней высоты от времени напыления до перекрытия мышьякового источника объясняется тем, что все конфигурации атомов Ga в подлежащем слое к этому моменту заняты, и избыток мышьяка с поверхности переиспаряется (коэффициент прилипания As на As при этих температурах равен 0).

На рис.2 приведены зависимости $\sigma(t)$ при различных условиях роста. Показано, что функция шероховатости поверхности от времени является осциллирующей в широком интервале температур подложки и соотношений потоков. При этом с ростом температуры подложки значение шероховатости падает до $T_s \sim 750K$, а далее $\sigma(t)$ возрастает вне зависимости от давления мышьяка P_{As} . Однако, если при низких температурах значение $\sigma(t)$ остается практически одинаковым с ростом P_{As} , то при повышении T_s до 750K шероховатость поверхности



Рис.2. Временные зависимости шероховатости поверхности

а) при температуре подложки 700К и соотношении потоков мышьяка и галлия 1,
 б) при температуре подложки 750К и соотношении потоков мышьяка и галлия 10.

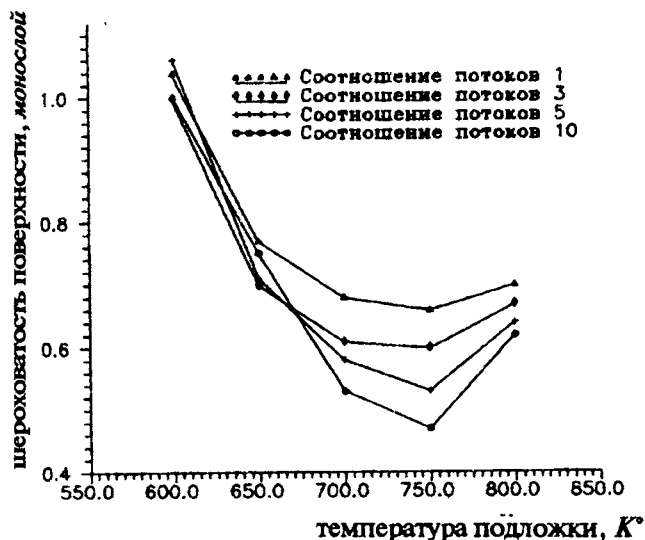


Рис. 3. Зависимости шероховатости поверхности от температуры подложки при различных соотношениях потоков.

несколько уменьшается с ростом давления мышьяка, что демонстрируется рис. 3, где приведены значения $\sigma(t)$ после пяти секунд напыления. Подобные зависимости наблюдались и экспериментально [9,10], где МСЭ-рост исследовался *in situ* методами поверхностной фотоабсорбции и дифракции быстрых электронов на отражение. При этом было показано, что при увеличении давления мышьяка и при понижении температуры подложки (вплоть до определенных значений) происходит улучшение качества границы раздела кристалл-вакуум.

Кроме того, необходимо отметить, что полученные результаты указывают на уменьшение величины шероховатости поверхности по отношению к методу МПЭ [11,12] приблизительно в 1.5–2 раза, что демонстрирует предпочтительность метода МСЭ для производства уникальных приборов для микро- и оптоэлектроники.

Заключение

Проведено исследование некоторых характерных черт роста в методе миграционно-стимулированной эпитаксии с помощью компьютерной модели. Получены временные зависимости средней высоты и шероховатости поверхности при различных условиях роста. Установлена предпочтительность метода МСЭ по отношению к методу МПЭ. Представленные результаты могут быть использованы для оптимизации ростовых процедур МСЭ роста для получения границ раздела повышенного качества.

Литература

1. Sakaki H., Tanaka M., Yoshimo J. // *J. Jpn. Appl. Phys.*, 1985, v.24, p.L417-L420.
2. Shimizu S., Tsukakoshi O., Komiya S., Makita Y. // *J. Vac. Sci. Technol. B*, 1985, v.3, N2, p.554-559.
3. Yamaguchi H., Kawashima M., Horikoshi Y. // *Appl. Surf. Sci.*, 1988, v.33/34, p.406-412.
4. Foxon C.T. // *J. Crystal Growth*, 1989, v.95, p.11-16.
5. Nagata S., Tanaka T. // *J. Appl. Phys.*, 1977, v.48, N3, p.940-942.
6. Филаретов А.Г., Цырлин Г.Э. // *ФТТ*, 1991, т.33, N5, с.1329-1336.
7. Arthur J.R. // *Surf. Sci.*, 1974, v.43, N2, p.449-461.
8. Cirlin G.E., Dubrovskiy V.G., Philaretov A.H. // *Abs. 11 Inter. Conf. on Computational Physics*, Amsterdam, 1990, p.54.
9. Horikoshi Y., Kawashima M., Kobayashi N. // *J. Crystal Growth*, 1991, v.111, p.200-204.
10. Takano Y., Lopez M., Torihata T., Ikei T., Kamaya Y., Pak K., Yonezu H. // *J. Crystal Growth*, 1991, v.111, p.216-220.
11. Цырлин Г.Э. Диссертация кандидата физико-математических наук, Институт аналитического приборостроения РАН, 1991.
12. Cirlin G.E. // *Proc. 4th Int. Conf. on Physics Computing*, World Scientific (ed. R. de Groot and J. Nadrchal), p.303-304.

GROWN DYNAMICS OF III-V COMPOUND SEMICONDUCATORS IN THE MIGRATION-ENHANCED EPITAXY TECHNIQUE: COMPUTER SIMULATIONS

G. E. Tsyrlin

Institute for Analytical Instrumentation RAS

Computer simulations of migration-enhanced epitaxial growth are used to obtain time dependences of the Ga As film average height and roughness under different growth conditions. It is shown that the average height vs time function is linearly stepwise and time dependences of roughness are oscillating in nature. It is found that the roughness may be 1.5-2 times reduced as compared to the molecular-beam epitaxy technique at optimal growth conditions.