

01;02;06

Динамика роста GaAs на вицинальной поверхности GaAs (100) в методе миграционно-стимулированной эпитаксии: компьютерное моделирование

© Г.Э. Цырлин

Институт аналитического приборостроения РАН, С.-Петербург

Поступило в Редакцию 12 ноября 1996 г.

В 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 при использовании миграционно-стимулированной эпитаксии на вицинальной поверхности GaAs(100).

Метод молекулярно-пучковой эпитаксии позволяет контролируемо выращивать монокристаллические полупроводниковые соединения с шириной переходных слоев в единицы монослоев. Это позволяет 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 молекулярно-пучковой эпитаксии затруднительно получить сверхрезкие границы раздела полупроводников различного состава и профиля легирования, что является важным при изготовлении структур с квантовыми ямами, проволоками и точками. 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 перекрытия заслонки источника, определяющего рост (в системе A_3B_5 — элемента 111 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 [3], получивший свое развитие в последние несколько лет. 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 на вицинальной поверхности GaAs (100).

Для описания процессов миграционно-стимулированной эпитаксии роста была использована компьютерная модель, предложенная в [6]. Основные положения модели заключались в следующем. Молекула мышьяка представлялась двухатомной, диссоциативная хемисорбция которой происходит 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:

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

где a — постоянная решетки; E_1 — энергия связи ближайших соседей; E_2 — энергии связи вторых соседей; $z(\mathbf{R})$ — 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 испарения и поверхностной миграции описывались соответственно в виде:

$$D = D_0 \exp(-E/kT_s), \quad (2)$$

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

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)–(3) рассчитывались на основании экспериментальных данных. При этом были получены следующие величины: $E_1 = 1.0$ эВ, $E_2 = 0.1$ эВ, $R_0 = 1.2 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$, $D_0 = 3.2 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$ [6]. Процесс моделирования был построен следующим образом: на поверхность осаждалось число атомов Ga в соответствии с требованиями заполнения монослоя (матрица содержала 30×30 узлов кристаллической решетки), далее следовало количество молекул As, 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 (100), разориентированная по направлению к [011] на 0.95° . Скорость роста соответствовала напылению 1 монослоя за секунду.

Результаты моделирования представлялись в виде временных зависимостей средней высоты $\langle H(t) \rangle$ и шероховатости поверхности $\sigma(t)$, вычисляемой по формуле

$$\sigma(t) = \sqrt{(1/N) \sum_{i,j} (\langle H(t) \rangle - H_{i,j}(t))^2}, \quad (4)$$

где N — количество элементарных ячеек в слое, $H_{i,j}(t)$ — высота слоя в данном месте i, j 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 5%.

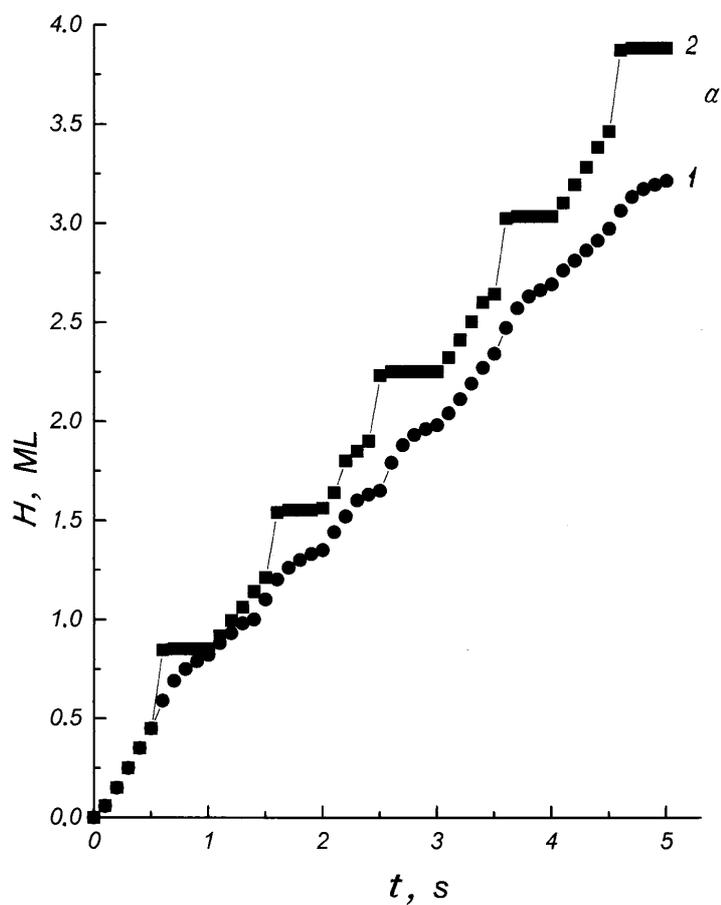


Рис. 1. Временные зависимости средней высоты (a) и производной средней высоты по времени (δ) для температуры подложки 700 К при соотношениях потоков мышьяка и галлия 1 (1) и 10 (2).

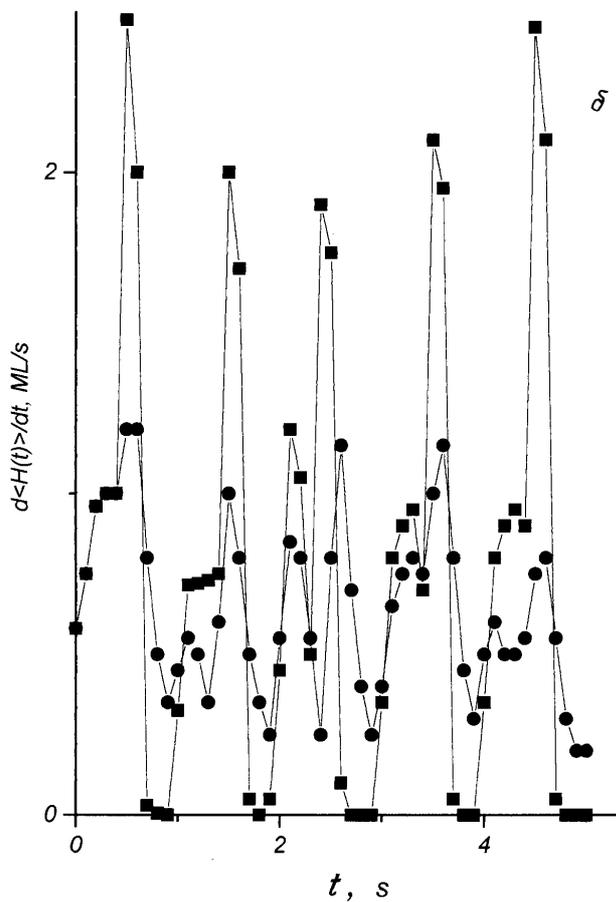


Рис. 1 (продолжение).

На рис. 1 приведены типичные зависимости средней высоты от времени при различных соотношениях потоков J_{As}/J_{Ga} . Показано, что $\langle H(t) \rangle$ обладает линейно-ступенчатым характером (более наглядно демонстрируемый зависимостью $d\langle H(t) \rangle/dt$), проявляющимся более ярко при повышении величины J_{As}/J_{Ga} . Ступенчатый ход зависимости может быть объяснен характером направления потоков на поверхность подложки при миграционно-стимулированном эпитаксиальном 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 атомов 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 $\langle H(t) \rangle$ 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 $\langle H(t) \rangle$ появляется участок более резкого возрастания средней высоты. Естественно, что повышение соотношения потоков приведет к приближению формы функции $\langle H(t) \rangle$ 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).

Установлено, что функция шероховатости поверхности от времени является осциллирующей в широком интервале температур подложки и соотношений потоков (пример приведен на рис. 2, а). При этом с ростом температуры подложки значение шероховатости падает до $T_s \sim 750$ К, 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 750 К шероховатость поверхности несколько уменьшается с ростом давления мышьяка, что

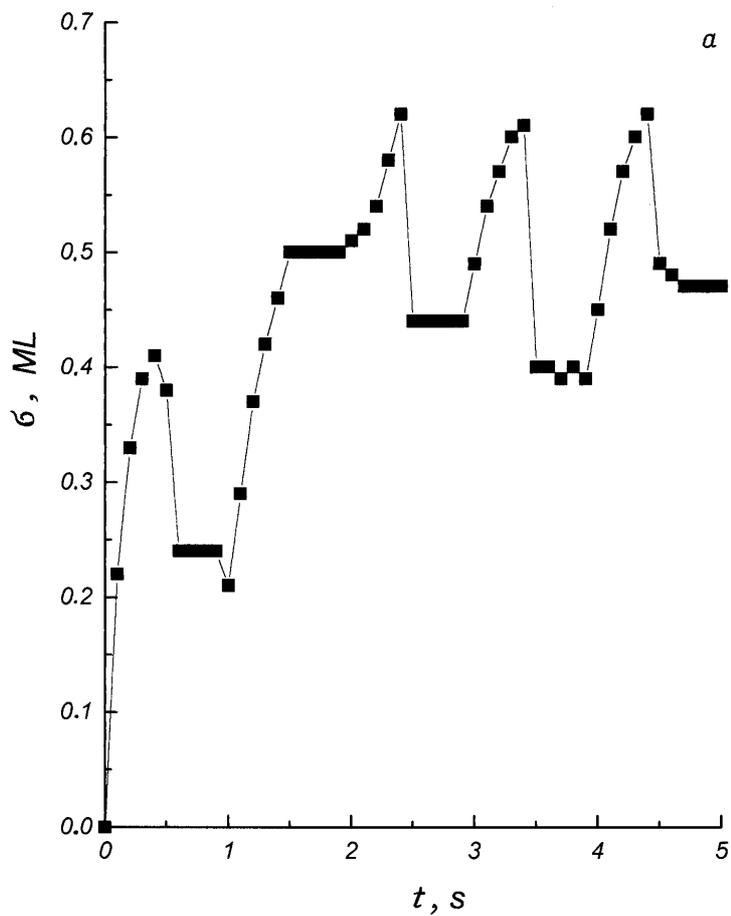


Рис. 2. *a* — временная зависимость шероховатости поверхности при температуре подложки 750 К и соотношения потоков мышьяка и галлия 10; *b* — зависимости шероховатости поверхности от температуры подложки при различных соотношениях потоков: 1 — 1; 2 — 2; 3 — 3; 4 — 5; 5 — 10.

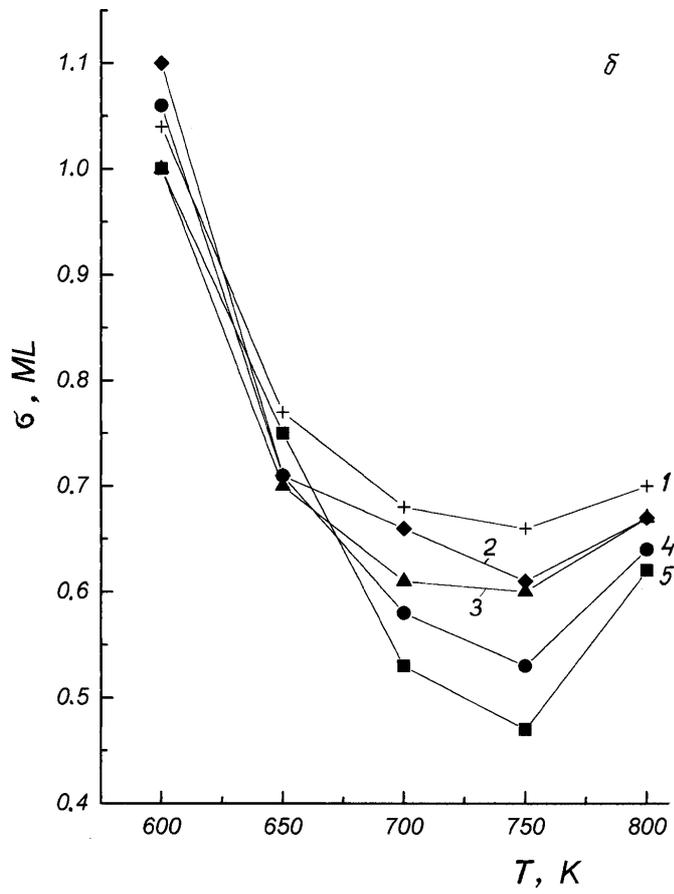


Рис. 2 (продолжение).

демонстрируется рис. 2, б, где приведены значения $\sigma(t)$ после пяти секунд напыления. Подобные зависимости наблюдались и экспериментально в [8,9], где миграционно-стимулированный эпитаксиальный 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.

В заключение необходимо отметить, что полученные результаты указывают на уменьшение величины шероховатости поверхности по отношению к методу молекулярно-пучковой эпитаксии [10] приблизительно в 1.5–2 раза, что демонстрирует предпочтительность метода миграционно-стимулированной эпитаксии для производства уникальных приборов для микро- и оптоэлектроники. Особенно это становится важным при использовании напряженных систем (например, InGaAs/GaAs), где за счет эффектов самоорганизации образуются квантовые точки [11,12], причем разброс по размерам нанобъектов становится значительно меньшим при использовании метода субмонослойной миграционно-стимулированной эпитаксии.

Данная работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант N 95–02–05084–а), фонда INTAS (грант № 94–1028) и научной программы ”Физика твердотельных наноструктур”.

Список литературы

- [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. N 2. 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. N 3. P. 940–942.
- [6] *Филаретов А.Г., Цырлин Г.Э.* // ФТТ. 1991. Т. 33. В. 5. С. 1329–1336.
- [7] *Arthur J.R.* // Surf. Sci. 1974. V. 43. N 2. P. 449–461.
- [8] *Horikoshi Y., Kawashima M., Kobayashi N.* // J. Crystal Growth. 1991. V. 111. P. 200–204.

- [9] *Takamo Y., Lopez M., Torihata T., Ikei T., Kamaya Y., Pak K., Yonezu H.* // J. Crystal Growth. 1991. V. 111. P. 216–220.
- [10] *Cirlin G.E.* // Proc. 4th Int. Conf. on Physics Computing. World Scientific (Ed. R. de Groot and J. Nadrchal). P. 303–304.
- [11] *Cirlin G.E., Guryanov G.M., Golubok A.O., Tipissev S.Ya., Ledentsov N.N., Kop'ev P.S., Grundmann M., Bimberg D.* // Appl. Phys. Lett. 1995. V. 67. P. 97–99.
- [12] *Guryanov G.M., Cirlin G.E., Petrov V.N., Polyakov N.K., Golubok A.O., Tipissev S.Ya., Gubanov V.B., Samsonenko Yu.B., Ledentsov N.N., Shchukin V.A., Grundmann M., Bimberg D., Alferov Zh.I.* // Surf. Sci. 1996. V. 352–354. P. 651–655.