

01;03
©1994 г.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРУБЧАТОГО ИСТОЧНИКА ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНО-ЛУЧЕВОЙ ЭПИТАКСИИ

Ю.Н.Григорьев, М.Ш.Шавалиев, В.П.Шапеев

Институт вычислительной технологии,
630090, Новосибирск
(Поступило в Редакцию 6 мая 1993 г.
В окончательной редакции 5 мая 1994 г.)

Получены аналитические выражения для радиального распределения потока молекул на подложку, создаваемого трубчатым источником молекулярного пучка. Численно исследована зависимость потока от геометрических параметров источника и формы эмиттирующей поверхности. Дана оценка точности вычисления потока с помощью диаграммы направленности источника. Использовалось прямое статистическое моделирование, контролируемое с помощью регулярного численного метода.

Введение

Одна из основных проблем молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) заключается в управлении слоем вещества, осаждаемого на поверхность подложки молекулярным пучком. Для оптимизации процесса эпитаксии необходимо знание углового распределения потока молекул в пучке в зависимости от физических характеристик и геометрических параметров установки МЛЭ.

В установках МЛЭ распространен трубчатый эффузионный источник молекулярных (атомных) пучков, схема которого представлена на рис. 1. Он представляет собой цилиндрическую трубку 1, частично заполненную веществом 3, испарение которого создает молекулярный поток (a — радиус трубки, L — длина ее свободной части). На расстоянии l от выходного сечения трубки находится плоская пластина 2, на которой размещена подложка.

В работе для этой схемы в случае, когда поверхность испарения 4 (эмиттер) — плоскость, дан вывод аналитических соотношений для радиального распределения плотности потока на подложку. Численные расчеты потока на подложку проведены двумя методами: прямым статистическим моделированием и регулярным. Исследована зависимость плотности потока от геометрических параметров L/a и l/a . Для

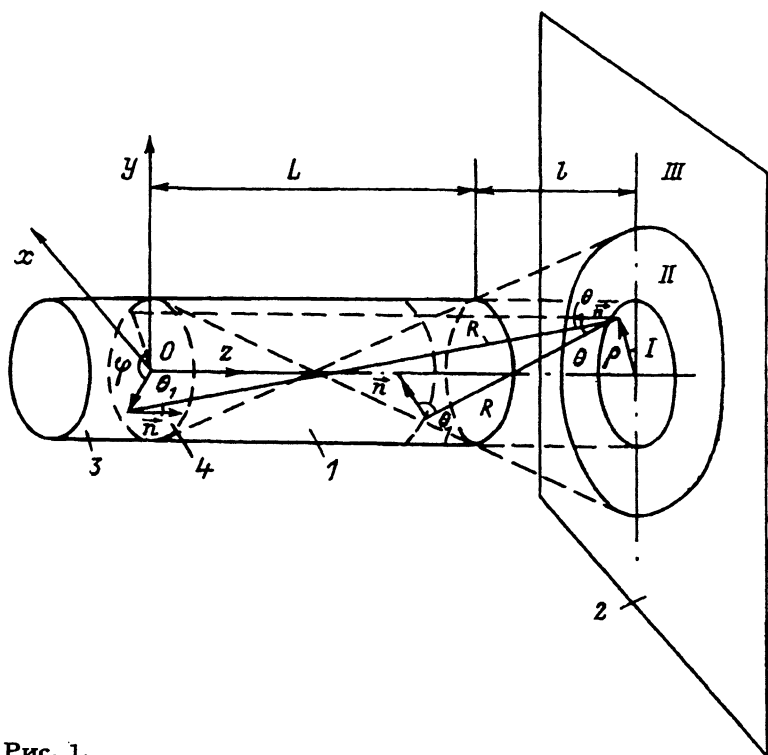


Рис. 1.

случая конического эмиттера установлено, что выбором геометрических параметров можно достичь высокой степени однородности распределения плотности потока.

Результаты непосредственных расчетов радиальных распределений сопоставлены с распределениями потоков, полученными на основе диаграммы направленности. Показано, что расчет на основе диаграммы направленности может привести к значительным погрешностям, особенно в центральной области подложки.

Постановка задачи и математическая модель

В постановке задачи приняты следующие предположения. Испускаемые эмиттером молекулы внутри трубки и вне ее движутся в свободно-молекулярном режиме течения, испытывая только столкновения со стенками трубки. На поверхности трубки имеет место полностью диффузное отражение с максвелловской функцией распределения [1]. Для молекул, вылетающих из эмиттера, в каждой его точке задается максвелловская функция распределения молекул по скоростям. Попадающие на эмиттер молекулы поглощаются. Геометрические параметры таковы, что обратным потоком молекул с подложки в трубку можно пренебречь.

При вычислении плотности потока на подложку на ней выделяются три зоны (рис. 1). В центральную зону I ($\rho \leq 1$) попадают молекулы со всей боковой поверхности трубки и нерассеянные молекулы с эмитте-

ра. В промежуточную зону II ($1 < \rho < (1 + 2l/L)$) попадают молекулы с некоторой части боковой поверхности и нерассеянные молекулы с части эмиттера. Наконец в периферийную зону III ($\rho \geq (1 + 2l/L)$) идут молекулы только с частей боковой поверхности. Здесь и далее использованы безразмерные величины. В качестве масштабов длины и потока взяты радиус трубки a и плотность потока с эмиттера j_0 , которая определяется скоростью испарения в пустоту [2],

$$j_0 = \frac{P_0}{(2\pi mkT)^{3/2}},$$

где P_0 — давление насыщенного пара материала эмиттера.

Для безразмерных геометрических параметров сохранены обозначения, введенные на рис. 1.

При указанных выше предположениях общее выражение для плотности потока молекул на подложку имеет вид [1]

$$j(\rho) = \frac{1}{\pi} \int_{S_1(\tau)} j(r_1) \frac{|\cos \vartheta_1 \cos \vartheta|}{R^2} dS_1. \quad (1)$$

Здесь $S_1(r)$ — видимая из точки на подложке с радиус-вектором r часть эмиттера и боковой поверхности трубки, ρ — проекция r на поверхность подложки, $R = |r - r_1|$, ϑ_1 и ϑ — углы между R и нормальями к поверхности S_1 в точке с радиус-вектором r_1 и к поверхности подложки в точке с r соответственно. Для точек эмиттера

$$\cos \vartheta_1 = |\cos \vartheta| = \frac{L+l}{R}, \quad R^2 = (L+l)^2 + \rho^2 + r_1^2 - 2\rho r_1 \cos \varphi, \quad (2)$$

а для точек боковой поверхности

$$\cos \vartheta = \frac{L+l-z}{R}, \quad \cos \vartheta_1 = \frac{1 - R \cos \varphi}{R},$$

$$R^2 = (L+l-z)^2 + 1 + \rho^2 - 2\rho \cos \varphi \quad (3)$$

(рис. 1). Необходимо вычислить $j(\rho)$ в каждой из зон. В случае центральной зоны интегрирование ведется по всему эмиттеру и по боковой поверхности трубки. После подстановки (2) и (3) в (1) и вычисления интегралов получается следующее соотношение для плотности потока в центральную зону подложки:

$$j(\rho) = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{(L+l)^2 + \rho^2 - 1}{\left\{ [(L+l)^2 + 1 + \rho^2]^2 - 4\rho^2 \right\}^{1/2}} \right] +$$

$$+ 2 \int_0^L dz j(z) \frac{(L+l-z)[(L+l-z)^2 + 1 - \rho^2]}{\left\{ [(L+l-z)^2 + 1 + \rho^2]^2 - 4\rho^2 \right\}^{3/2}}, \quad (4)$$

где первый член — вклад от эмиттера, а интегральный член — вклад от боковой поверхности.

В случае промежуточной зоны интегрирование проводится по части эмиттера, получающейся при проектировании на него выходного отверстия с центром проекции в рассматриваемой точке подложки. Границами области интегрирования являются дуги окружностей

$$\begin{aligned}x_1^2 + y_1^2 &= 1, \\x_1^2 + \left(y_1 - \rho \frac{L}{l}\right)^2 &= \left(1 + \frac{L}{l}\right)^2,\end{aligned}$$

которые выражаются как

$$\begin{aligned}Y_1(x) &= - \left[\left(1 + \frac{L}{l}\right)^2 - x^2 \right]^{1/2} + \rho \left(1 + \frac{L}{l}\right), & Y_2^\pm(x) &= \pm (1 - x^2)^{1/2} + \rho, \\X &= \left\{ 1 - \frac{1}{4\rho^2} \left[2 - (\rho^2 - 1) \frac{L}{l} \right]^2 \right\}^{1/2}.\end{aligned}\quad (5)$$

Здесь для удобства начало координат сдвинуто вдоль оси y в точку $y = -\rho$. При интегрировании выделяются два случая, когда центральный угол дуги Y_2 меньше или больше π . Им соответствуют кольцевые зоны на подложке $(1 + 2l/L)^{1/2} < \rho \leq (1 + 2l/L)$ и $1 < \rho \leq (1 + 2l/L)^{1/2}$. Потоки от эмиттера в эти зоны даются интегралами

$$j'_e(\rho) = 4 \frac{(L+l)^2}{(2\pi)^{3/2}} \int_0^X dx \int_{Y_1(x)}^{Y_2^+(x)} \frac{dy}{[y^2 + x^2 + (L+l)^2]^2}, \quad (6)$$

$$j''_e(\rho) = j'_e(\rho) + 4 \frac{(L+l)^2}{(2\pi)^{3/2}} \int_X^1 dx \int_{Y_2^-(x)}^{Y_2^+(x)} \frac{dy}{[y^2 + x^2 + (L+l)^2]^2}. \quad (7)$$

Область интегрирования по частям боковой поверхности трубки, видимой из точек промежуточной кольцевой зоны II, ограничена кривой, точки которой при данном значении $z = c$ получаются в пересечении боковой поверхности с проекцией выходного отверстия на плоскость $z = c$ с центром проекции в рассматриваемой точке подложки. В цилиндрических координатах после перехода от ϕ к $\pi - \phi$ эта кривая записывается в виде

$$\Phi(z) = \arccos \left[\frac{(L+l-z)(\rho^2-1)}{2\rho l} - \frac{\rho^2+1}{2\rho} \right]. \quad (8)$$

Тогда вклад от боковой поверхности в плотность потока в промежуточную зону определяется выражением

$$j_c(\rho) = \frac{2}{\pi} \int_0^L dz j(\dot{z})(L+l-z) \int_0^{\Phi(z)} \frac{1 + \rho \cos \phi}{[(L+l-z)^2 + \rho^2 + 1 + 2\rho \cos \phi]^2} d\phi. \quad (9)$$

Плотность потока в периферийной зоне дается выражением (9), в котором нижний предел интегрирования по z заменен на $z^* = L - 2l/(\rho - 1)$,

$$j(\rho) = \frac{2}{\pi} \int_{z^*}^L dz j(z) (L + l - z) \int_0^{\Phi(z)} \frac{1 + \rho \cos \phi}{[(L + l - z)^2 + \rho^2 + 1 + 2\rho \cos \phi]^2} d\phi. \quad (10)$$

Полученные выше соотношения не замкнуты, так как в них входит неизвестная величина $j(z)$ — плотность потока на боковую поверхность трубки. При свободномолекулярном течении в трубке эта величина удовлетворяет уравнению типа Клаузинга [1]. В системе принятых обозначений оно может быть записано в виде

$$j(z) = \frac{1}{2} \int_0^L dz_1 j(z_1) \left[1 - |z - z_1| \frac{(z - z_1)^2 + 6}{[(z - z_1)^2 + 4]^{3/2}} \right] + \frac{1}{2} \left[\frac{z^2 + 2}{(z^2 + 4)^{1/2}} - z \right]. \quad (11)$$

Здесь свободный член является безразмерной плотностью прямого потока частиц с эмиттера в данную точку внутренней поверхности трубки. В общем случае уравнение (11) разрешимо лишь численно, что обуславливает численное решение задачи в целом.

В полученных выше выражениях (6), (7), (9), (10) можно выполнить интегрирование по одной из переменных. Однако на практике при численном интегрировании оказалось целесообразным использовать исходные формулы (6), (7), (9), (10), имеющие более простую структуру.

Представляет интерес рассмотрение некоторых предельных случаев. При $L = 0$ задача переходит в задачу об истечении газа через круглое отверстие. Здесь распределение плотности потока на всей поверхности подложки описывается единым выражением

$$j(\rho) = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{l^2 + \rho^2 - 1}{[(l^2 + 1 + \rho^2)^2 - 4\rho^2]^{1/2}} \right], \quad (12)$$

которое получается из (4) и (7).

Для вычисления потоков на подложку часто пользуются приближенным методом, основанным на диаграмме направленности источника (см., например, [3,4]). Она определяется как плотность потока молекул на поверхности сферы единичного радиуса, центр которой совпадает с центром выходного сечения трубки. При этом реальный поток в выходном сечении заменяется фиктивным, в котором все траектории молекул проходят через центр, а распределение по направлениям остается прежним.

Чтобы получить диаграмму направленности источника, необходимо вычислить поток молекул $j(\theta)$, вылетающих из трубки под углом θ к ее оси. При $\theta \leq \theta_0$, где $\text{tg } \theta_0 = 2/L$, в $j(\theta)$ попадают молекулы с некоторой части боковой поверхности трубки и нерассеянные молекулы с части эмиттера, а при $\theta > \theta_0$ — только с части боковой поверхности (рис. 2). Области интегрирования по боковой поверхности эмиттера

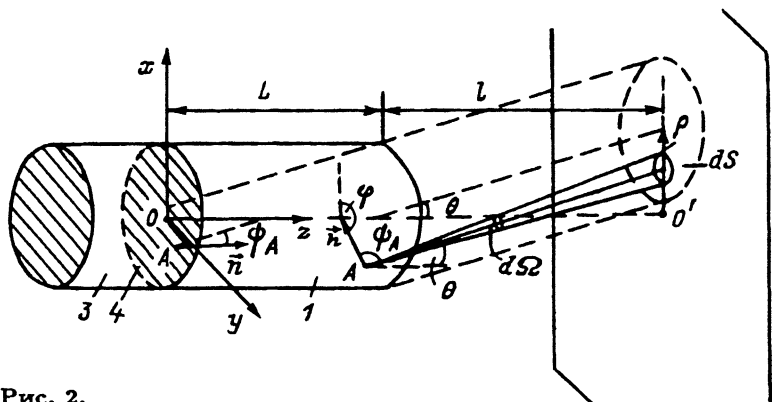


Рис. 2.

определяются линией пересечения их цилиндром, у которого ось проходит через центр выходного отверстия трубки под углом θ , а сечение плоскостью $z = L$ совпадает с выходным отверстием трубки. Границей интегрирования по боковой поверхности является кривая

$$\Psi(z) = \arccos\left(\frac{\rho}{2l}z\right), \quad (13)$$

где $0 \leq z \leq L$ при $\theta \leq \theta_0$, $z_1 \leq z \leq L$ при $\theta > \theta_0$,

$$z_1 = L\left(1 - \frac{1}{V}\right), \quad V = \frac{L}{2} \operatorname{tg} \theta.$$

Соответственно по поверхности эмиттера граница образуется дугами окружностей

$$\begin{aligned} X_1(y) &= -\sqrt{1-y^2}, & X_2(y) &= -\sqrt{1-y^2} - 2V, \\ & & & -\sqrt{1-V^2} \leq y \leq \sqrt{1-V^2}. \end{aligned} \quad (14)$$

Безразмерный поток в рассматриваемом направлении, создаваемый элементарной площадкой с нормалью в некоторой точке A , равен $j(z) \cos \Psi_A$, где Ψ_A — угол между нормалью в точке A и прямой, проходящей через точку A под углом θ к направлению оси z . На боковой поверхности $\cos \Psi_A = \sin \theta \cos \phi$, а на эмиттере $\cos \Psi_A = \cos \theta$.

Тогда для результирующего потока молекул, вылетающих под углом θ к оси трубки, можно написать

$$\begin{aligned} j(\theta) &= \frac{2}{\pi} \cos \theta \int_0^{\sqrt{1-V^2}} dy \int_{x_1(y)}^{x_2(y)} dx + \frac{2}{\pi} \sin \theta \int_0^L j(z) dz \int_{\pi}^{\Psi(z)} \cos \phi d\phi, & \theta \leq \theta_0, \\ j(\theta) &= \frac{2}{\pi} \sin \theta \int_{z_1}^L j(z) dz \int_{\pi}^{\Psi(z)} \cos \phi d\phi, & \theta > \theta_0, \end{aligned} \quad (15)$$

где плотность потока на боковую поверхность определяется из уравнения Клаузинга (11).

Знание диаграммы направленности $j(\theta)$ позволяет вычислить плотность потока молекул на подложку. Поток молекул, распространяющихся под углом θ в элементе телесного угла $d\Omega$ и падающих на элемент площадки подложки dS , равен (рис. 2)

$$dN = j(\theta)d\Omega = j(\theta)\frac{\cos\theta}{l^2 + \rho^2}dS.$$

Так как $\rho/l = \operatorname{tg}\theta$, то плотность потока на подложку определяется выражением

$$j(\rho) = \frac{dN}{dS} = j(\theta)\frac{\cos^3\theta}{l^2}. \quad (16)$$

При $L = 0$ из (15), (16) следует

$$j(\rho) = \frac{l^2}{(l^2 + \rho^2)^2}. \quad (17)$$

Для больших удалений подложки от трубки ($l \gg 1$) из точного выражения (12) можно получить асимптотику вида

$$j(\rho) = \frac{l^2}{(l^2 + \rho^2)^2} \left[1 - \frac{l^2 - 2\rho^2}{(l^2 + \rho^2)^2} \right]. \quad (18)$$

В (18) первый член совпадает с (17), а второй член, имеющий порядок l^{-2} , обусловлен конечным размером выходного отверстия и дает оценку погрешности, которую вносит использование диаграммы направленности в этом простейшем случае.

Результаты численного моделирования

Численное исследование распределения плотности потока молекул в работе проводилось методом ПСМ [5] и регулярным методом, в котором использовались обычные квадратурные формулы на регулярных сетках. Это позволило сопоставить эффективность двух подходов и оценить независимо погрешность ПСМ для данного класса задач.

Общая схема и реализация основных процедур алгоритма ПСМ были взяты из [5]. Для статистического оценивания распределения потока на подложку моделировались траектории пробных частиц, вылетающих с эмиттера. Модельные траектории обрывались при попадании частиц на подложку или эмиттер.

В регулярном методе решение уравнения Клаузинга (11) выделялось в отдельный этап. При этом интеграл аппроксимировался квадратурной формулой Симпсона, соответствующая система линейных алгебраических уравнений решалась итерационным одношаговым методом с выбором оптимального параметра [6].

В предварительных расчетах исследовалась практическая точность и сходимость обоих методов в зависимости от геометрических параметров задачи при мельчении шага сетки и увеличении числа

“траекторий” частиц. В тестовых расчетах использовалось сопоставление результатов с аналитическим решением (12) при $L = 0$. Точность вычисления потока внутри источника проверялось соотношением [1]

$$j(L/2) = 1/2. \quad (19)$$

В регулярном методе это соотношение выполнялось в высокой степени точности. Например при шаге $h_z = 4.5 \cdot 10^{-2}$ и $L = 8$ расхождение с (19) составляло $8 \cdot 10^{-4}$. В методе ПСМ приемлемый уровень статистических флуктуаций (дисперсии) оценки плотности потока достигался, когда общее число пробных частиц превышало $N_0 \approx 10^6$. При этом расчетная плотность потока на стенке трубки и в центральной зоне подложки совпадала с соответствующими результатами, полученными регулярным методом, в трех значащих цифрах. Надо отметить, что этот стандартный для метода Монте-Карло уровень точности даже при средних удлинениях $L \approx 4$ требовал примерно одного часа машинного времени на БЭСМ-6. Соответствующие затраты для регулярного метода были ничтожно малы.

Параметрические расчеты распределения потока частиц на подложку проводились в диапазонах $0.5 \leq L \leq 8$, $15 \leq l \leq 25$. Уравнение Клаузинга регулярным методом решалось при относительных удлинениях трубки до $L = 12$. В таком диапазоне в работе [7] численное решение уравнения Клаузинга было получено вариационным методом. В этой части результаты обеих работ совпадают.

Построенные численные решения с точностью до погрешностей использованных методов близки к линейным зависимостям. Таким образом, для рассмотренного диапазона L приближение Клаузинга [1]

$$j(z) = j(0) - \frac{j(0) - j(L)}{L} z \quad (20)$$

имеет прямое подтверждение.

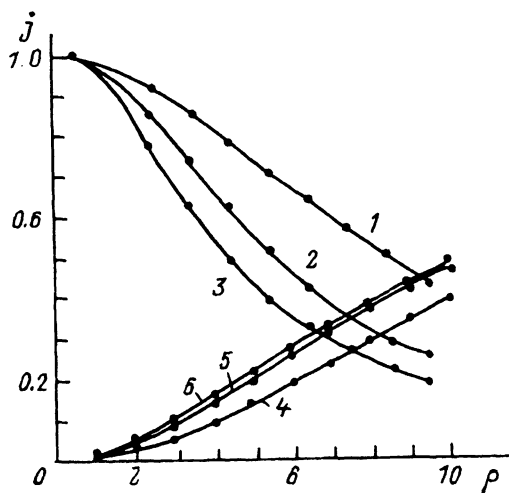


Рис. 3.

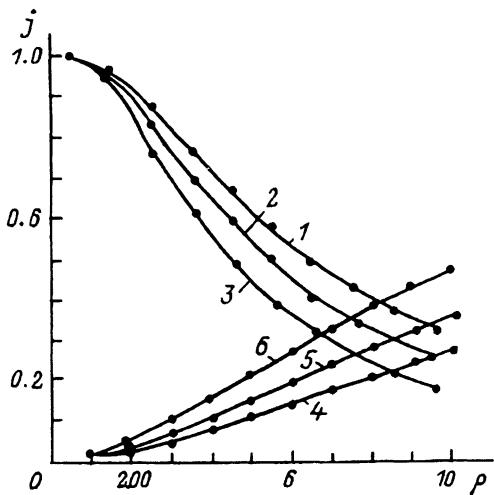


Рис. 4.

Надо отметить, что по сравнению с регулярным численным методом данной работы использованный в [7] методом Галеркина более громоздок в реализации, а точность его зависит от удачного выбора базисных функций и с этой точки зрения носит эмпирический характер.

На рис. 3 приведены результаты для $L = 1, 4.5, 8$ при $l = 15$. Кривые 1-3 представляют соответствующие распределения плотности потока $j(\rho)$, а 4-6 — доли частиц, попавших в круг радиуса ρ , от полного расхода источника. На рис. 4 эти же величины приведены для $l = 15, 20, 25$ и удлинения $L = 8$.

Из расчетов видно, что $j(\rho)$ с ростом радиуса ρ при меньших удлинениях трубки убывает медленнее, чем при больших. С увеличением расстояния от источника до подложки распределение $j(\rho)$ также становится более равномерным, но абсолютное значение плотности при этом существенно падает. Так, при $L = 1$ и $l = 15$ число молекул, попавших в круг радиуса 10, превышает соответствующее число при $l = 25$ более чем вдвое.

Было исследовано также влияние формы эмиттера на степень однородности распределения потока молекул на подложку. Рассматривались конфигурации в форме конуса и цилиндрического стержня, реально возникающие в процессе испарения. На рис. 5 приведены рас-

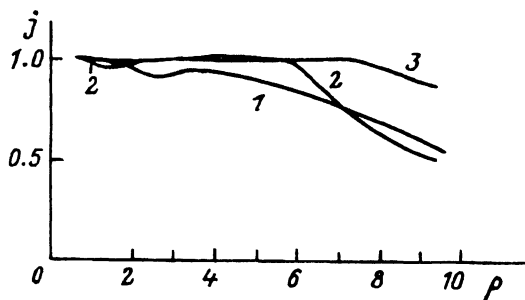


Рис. 5.

пределаения $j(\rho)$ при конической форме эмиттера ($1 - L = 4.5, h = 0.5$; $2 - L = 4.5, h = 2.25$; $3 - L = 8, h = 4, l = 20$; L — расстояние от основания конуса, которое совпадает с сечением трубки, до выходного отверстия, h — высота конуса). Коническая форма эмиттера по сравнению с плоской приводит к более однородному распределению $j(\rho)$. Из рис. 5 видно, что с увеличением высоты конуса $j(\rho)$ в области $\rho \leq 6-7$ становится все более однородным. Отклонение от постоянной не превышает 2% (кривая 2). Это объясняется тем, что при коническом эмиттере возрастает доля молекул, рассеянных поверхностью трубки, которые способствуют выравниванию распределения $j(\rho)$ в центральной и промежуточной зонах.

Из расчетов следует, что эмиттер в виде поверхности цилиндра диаметром, меньшим чем диаметр трубки, также выравнивает распределение $j(\rho)$, хотя и в меньшей степени, чем конический эмиттер.

Если воспользоваться в (15) приближением Клаузинга (20), то выражения для диаграммы направленности принимает вид конечных соотношений

$$j(\theta) = \cos \theta j(0) \left[\frac{1}{j(0)} \left(1 - \frac{2}{\pi} V \sqrt{1 - V^2} - \frac{2}{\pi} \arcsin V \right) + \right. \\ \left. + \frac{2}{3\pi} (2 + \gamma) V \sqrt{1 - V^2} + \frac{2}{\pi} \gamma \arcsin V + \right. \\ \left. + \frac{4}{3\pi V} (1 - \gamma) \left(1 - V \sqrt{1 - V^2} \right) \right], \quad \gamma = \frac{j(L)}{j(0)}, \quad \theta \leq \theta_0, \\ j(\theta) = \cos \theta j(0) \left[\gamma + \frac{4}{3\pi V} (1 - \gamma) \right], \quad \theta > \theta_0. \quad (21)$$

Аналогичные формулы ранее были получены в [3], но в них принималось $j(0)/j_0 = 1$, что справедливо только для бесконечно длинных трубок.

Кривые 1-3 на рис. 6 представляют зависимости $j(\theta)/j(0)$, рассчитанные по формулам (21) при удлинениях трубки $L = 1, 4.5, 8$. Видно, что с возрастанием длины трубки диаграмма становится все более

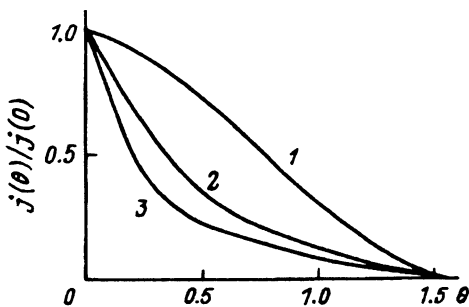


Рис. 6.

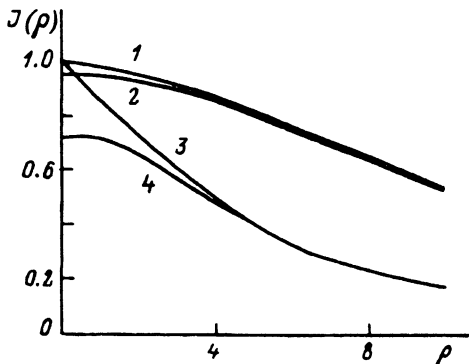


Рис. 7.

остронаправленной. Следует отметить, что сопоставление этих результатов с прямым статистическим моделированием диаграмм показало, что расхождение не превышает погрешности метода ПСМ. Это означает, что соотношения (21) удовлетворительно описывают реальное угловое распределение молекул на выходе из источника. Вместе с тем, как показали расчеты, использование диаграмм направленности при вычислении потоков на подложку может привести к значительным погрешностям, неприемлемым для практических задач. Это демонстрирует рис. 7, где дано сравнение распределений $J(\rho)$, вычисленных по формулам (16), (21) (кривые 1,3) с полученными методом ПСМ (кривые 2,4) при $l = 20$ и $L = 1$ (кривые 1,2) и $L = 8$ (кривые 2,4). Геометрические параметры выбраны в диапазоне, характерном для реальных установок МЛЭ, где обычно используются $l = 15-25$, $L = 1-8$. Наибольшее расхождение получается в центральной области ($\rho \leq 3$). Величина расхождения увеличивается с ростом удлинения трубки.

В целом результаты работы показывают, что математическое моделирование источников для МЛЭ даже на основе простых моделей позволяет получить полезные для практики характеристики процесса.

Список литературы

- [1] Коган М.И. Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967. 440 с.
- [2] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Часть I. М.: Наука, 1976. 584 с.
- [3] Иванов Б.С., Троицкий В.С. // ЖТФ. 1963. Т. 33. Вып. 4. С. 494-499.
- [4] Nambu K., Watanabe Y. // Vacuum. 1986. Vol. 36. N 6. P. 349-354.
- [5] Берд Г. Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1982. 320 с.
- [6] Багвалов Н.С. Численные методы. М.: Наука, 1973. 632 с.
- [7] Неудачин И.Г., Породнов Б.Т., Суетин П.Е. // ЖТФ. 1972. Т. 42. Вып. 5. С. 1069-1072.

