

# ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИСТОЧНИКА МОЛЕКУЛЯРНО-ЛУЧЕВОЙ ЭПИТАКСИИ ПРИ РАЗЛИЧНОМ ХАРАКТЕРЕ ОТРАЖЕНИЯ МОЛЕКУЛ

© В. П. Шапеев, О. А. Шмагунов

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН,  
630090 Новосибирск, Россия

(Поступило в Редакцию 4 августа 1995 г.)

## Введение

Одна из основных проблем молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) заключается в управлении слоем вещества, осаждаемого на поверхности подложки, помещенной в молекулярный поток. Для оптимизации процесса эпитаксии необходимо знание зависимости распределения толщины слоя вещества от физических характеристик потока и 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 в случае зеркального (с сохранением угла падения) отражения молекул от стенок источника (вывод аналитических соотношений в случае диффузного отражения приведен в работе [1]). Приводится сравнительный анализ расчетов для двух типов отражения при различных геометрических параметрах  $L/a$  и  $l/a$  источника МЛЭ. Обсуждаются требования к точности расчетов и связанные с этим проблемы при использовании метода ПСМ. Затрагиваются вопросы практического применения решения данной задачи.

## Постановка задачи и математическая модель

В рассматриваемой задаче приняты следующие предположения. Испускаемые эмиттером молекулы внутри трубки и вне ее движутся в свободно молекулярном режиме течения, испытывая столкновения только со стенками трубки. Рассмотрены два варианта взаимодействия молекул со стенкой: полностью диффузное отражение с максвелловской функцией распределения [2] и полностью зеркальное отражение с сохранением угла падения. Для молекул, вылетающих из эмиттера, в каждой его точке задается максвелловская функция распределения по скоростям. Попадающие на эмиттер молекулы погло-

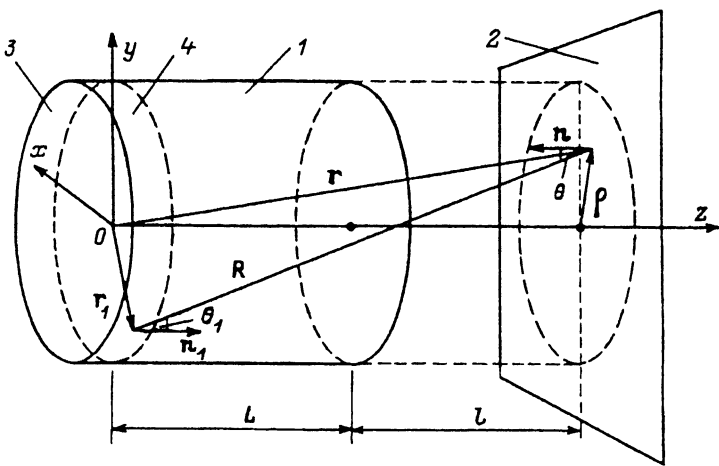


Рис. 1.

щаются. Геометрические параметры таковы, что обратным потоком молекул с подложки в трубку можно пренебречь.

Случай диффузного отражения молекул от стенок трубки подробно анализировался в работе [1]. Поэтому в данной работе рассматривается главным образом случай зеркального типа взаимодействия молекул со стенками. Для подсчета суммарного потока, приходящего в точку  $D$  подложки (рис. 2, а), надо проинтегрировать все элементарные потоки, приходящие в  $D$  напрямую с эмиттера и после отражения от стенок источника. Траектории всех молекул лежат внутри конуса с вершиной  $D$ , проходящего через край выходного сечения трубки. Если каждую ломаную траекторию  $ABCD$  "спрямить" путем ее замены отрезком прямой  $A'D$  (рис. 2, б), на которой лежит последнее звено  $CD$ , то каждой истинной траектории взаимно однозначно будет поставлена в соответствие фиктивная прямолинейная траектория. Причем угол, под которым молекула вылетает с эмиттера, останется неизменным. Такая замена делает суммарный поток, приходящий в точку  $D$  от источника с зеркально отражающими стенками, эквивалентным потоку с

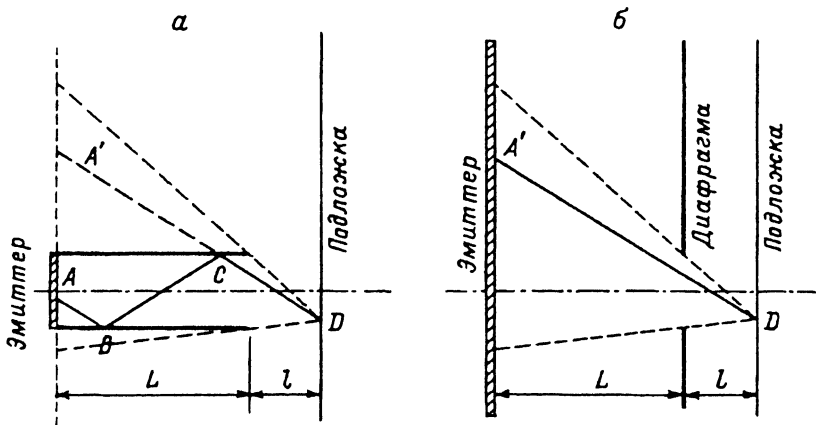


Рис. 2.

пятна Кнудсена”, образованного пересечением вышеописанного конуса с плоскостью эмиттера. Таким образом, исходная сложная задача моделирования зеркальной трубки оказалась сведенной к существенно более простой, которая может быть сформулирована следующим образом: нужно рассчитать поток на подложку от бесконечного эмиттера через диафрагму, расположенную на месте выходного сечения трубки. При этом задача становится похожей на расчет потока от “пятна Кнудсена”, поскольку сводится к вычислению потока в каждой точке подложки от видимой через диафрагму части пластины. При фиксированных  $L$  и  $l$  размер этой области является фиксированным, но положение зависит от положения точки подложки. Расчеты были продублированы методом ПСМ для зеркальной трубки. Результаты оказались идентичными.

В качестве масштабов длины и потока взяты радиус трубки  $a$  и плотность потока с эмиттера  $j_0$ , которая определяется скоростью испарения в пустоту [3],

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

где  $P_0$  — давление насыщенного пара вещества эмиттера.

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

При указанных выше предположениях общее выражение для плотности потока на подложку имеет вид [2]

$$j(\rho) = \frac{1}{\pi} \int_{S_1(\tau)} j(r_1) \frac{|\cos \theta_1 \cos \theta|}{R^2} dS_1. \quad (1)$$

Здесь  $S_1(\tau)$  — видимая из точки на подложке с радиус-вектором  $\tau$  часть эмиттера,  $\rho$  — проекция  $\tau$  на поверхность подложки,  $|\mathbf{R}| = |\tau - r_1|$ ,  $\theta_1$  и  $\theta$  — углы между  $\mathbf{R}$  и нормальными к поверхности  $S_1$  в точке с радиус-вектором  $\mathbf{r}_1$  и к поверхности подложки в точке с радиус-вектором  $\mathbf{r}$  соответственно.

В случае зеркального отражения  $S_1(\tau)$  представляет собой круг с радиусом  $r_k \equiv \text{const} = a(1 + L/l)$  (рис. 2).

$$\cos \theta_1 = |\cos \theta| = \frac{L+l}{R}, \quad R^2 = (L+l)^2 + \rho'^2 + r_1^2 - 2\rho'r_1 \cos \varphi, \quad (2)$$

где  $\rho' = \rho(1 + L/l)$  — расстояние между точкой подложки с радиус-вектором  $\tau$  и проекцией на нее центра круга  $S_1(\tau)$ .

После подстановки (2) в (1) имеем

$$j(\rho) = \frac{1}{\pi} \int_0^{r_k} dr_1 r_1 \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{(L+l)^2}{[(L+l)^2 + \rho'^2 + r_1^2 - 2\rho'r_1 \cos \varphi]^2}. \quad (3)$$

Интеграл (3) сводится к табличным, после взятия которых получим безразмерную плотность потока молекул в точке  $\rho$  подложки

$$j(\rho) = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{(L+l)^2 + \rho'^2 - r_k^2}{\sqrt{[(L+l)^2 + \rho'^2 + r_k^2]^2 - 4\rho'^2 r_k^2}} \right]. \quad (4)$$

Формулу (4) можно несколько упростить, если подставить в нее значения  $\rho'$  и  $r_k$ ,

$$j(\rho) = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{l^2 + \rho^2 - a^2}{\sqrt{(l^2 + \rho^2 + a^2)^2 - 4\rho^2 a^2}} \right]. \quad (5)$$

Интересно отметить, что из формулы (5) исчезла зависимость от параметра  $L$ , т.е. при зеркальном отражении молекул от стенок источника распределение потока на подложку не зависит от длины трубки. Сама же формула (5) описывает истечение газа через круглое отверстие радиуса  $a$ , расположенное на месте выходного сечения. Эта формула и аналогичные формулы из [1] позволяют рассчитать плотность потока в произвольной точке и на произвольной поверхности.

### Результаты численного моделирования

В приведенных ниже результатах распределение плотности потока молекул рассчитывалось по формуле (5) в случае зеркального отражения молекул от стенок источника и по аналитическим формулам, полученным в [1] в случае диффузного отражения. Кроме того, для контроля использовался метод ПСМ [4], который пригоден для решения подобных задач в более общих случаях, в частности при произвольных формах источника. Однако метод ПСМ требует больших затрат времени.

На рис. 3 представлены три графика распределения плотности потока молекул на подложку, рассчитанные при одних и тех же параметрах источника МЛЭ ( $L = 8, l = 15$ ). Монотонная кривая соответствует расчету по формуле (5), кривая с квадратиками — расчету методом ПСМ при использовании  $10^6$  пробных молекул и кривая с кружочками — расчету методом ПСМ при использовании  $10^7$  пробных молекул.

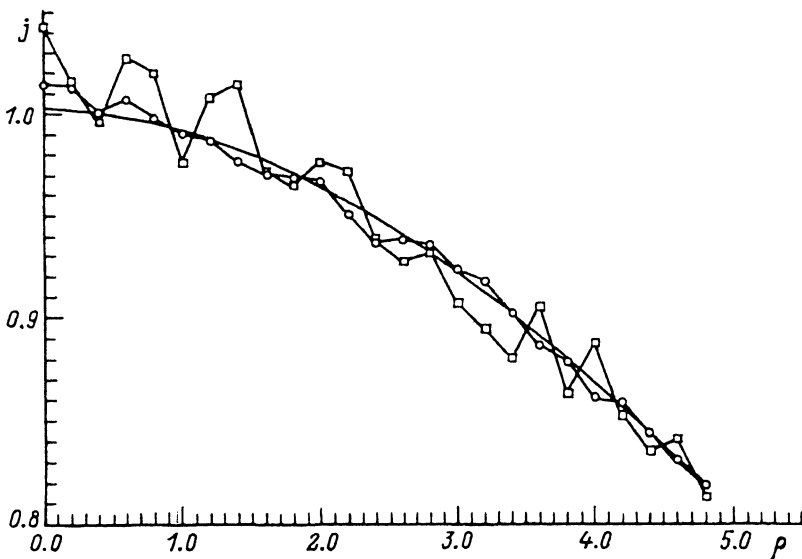


Рис. 3.

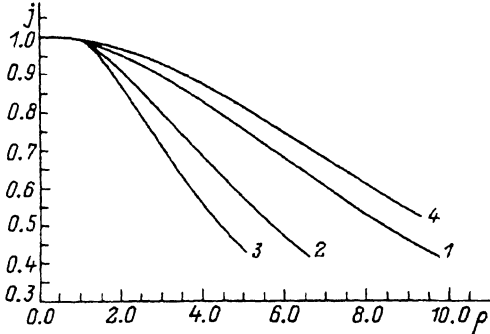


Рис. 4.

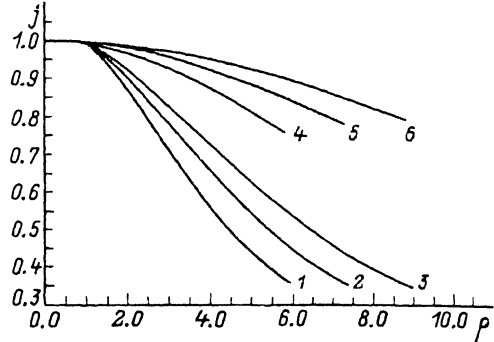


Рис. 5.

Погрешность счета в третьем случае примерно в 3 раза меньше, чем во втором, но все же остается довольно значительной и составляет около 1% от  $j(0)$ . Простая статистическая оценка (как известно, погрешность обратно пропорциональна  $\sqrt{N}$ , где  $N$  — число молекул) показывает, что для достижения точности счета 0.1% (а именно такая точность желательна для расчета плотности потока при  $\rho \leq 1$ ) требуется  $10^9$  пробных молекул. При этом расчет методом ПСМ требует больших вычислительных мощностей. Поэтому в данной работе метод ПСМ использовался прежде всего для контроля результатов, получаемых регулярным методом.

Рис. 4 воспроизводит результаты, полученные в [1] для источника с диффузно отражающими стенками для  $L = 1, 4.5, 8$  при  $l = 15$  (кривые 1-3), и результаты, полученные по формуле (5) для источника с зеркально отражающими стенками при тех же параметрах источника (кривая 4). В последнем случае распределения для трех различных значений  $L$  совпадают, поскольку, как следует из формулы (5), для источника с зеркально отражающими стенками распределение плотности потока молекул на подложку не зависит от длины трубки  $L$  источника. Сравнительный анализ кривых 1-3 и 4 показывает, что чем меньше  $L$ , тем меньше характер отражения молекул от стенок трубки влияет на распределение  $j(\rho)$ . В самом деле, при малых  $L$  вклад в распределение отраженных от стенок молекул мал и независимо от характера отражения источник работает как излучающее пятко Кнудсена радиуса  $a$ , расположенное на месте эмиттера. И напротив, при больших  $L$  различие оказывается весьма существенным. Это связано прежде всего с тем, что в случае зеркального отражения молекул распределение плотности в периферийной от оси источника зоне определяется молекулами, вылетевшими с эмиттера под большими углами  $\theta_1$ . В случае же диффузного отражения вклад таких молекул в общее распределение с ростом  $L$  уменьшается, поскольку для них увеличивается вероятность вернуться на эмиттер.

Кривые 1-3 на рис. 5 соответствуют результатам, полученным в [1] для источника с диффузно отражающими стенками для  $l = 15, 20, 25$  при  $L = 8$ . Кривые 4-6 характеризуют источник со вторым типом отражения при тех же геометрических параметрах. Качественно поведение кривых 4-6 похоже на поведение кривых 1-3, но характеризуется более равномерным распределением.

При средних параметрах установок МЛЭ различие в распределениях плотности потоков молекул на подложку при различных типах

отражения молекул от стенок источника достигает на расстоянии двух радиусов эмиттера от центра подложки величины порядка 1%. На современном уровне развития технологии напыления эта величина является существенной и может быть измерена в эксперименте. Располагая результатами физического эксперимента, можно было бы по характеру распределения толщины напыленного слоя на подложке судить о характере взаимодействия молекул со стенками источника, в частности приближенно оценить количественное соотношение между диффузно и зеркально отраженными молекулами и, возможно, зависимость этого соотношения от температуры стенок источника. Эта задача представляет собой немалый как физический, так и практический интерес.

Следует отметить также, что эта задача предьявляет определенные требования к точности численного расчета. И для ее решения совершенно непригоден применяемый на практике метод диаграммы направленности, оценка точности которого была дана в [1].

Авторы выражают благодарность за внимание к работе С.И. Чичичеву и Д.Н. Придачину.

### Список литературы

- [1] Григорьев Ю.Н., Шавалиев М.Ш., Шапеев В.П. // ЖТФ. 1994. Т. 64. Вып. 8. С. 24–34.
- [2] Коган М.И. Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967. 440 с.
- [3] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Часть I. М.: Наука, 1976.
- [4] Берд Г. Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981. 320 с.

01;02;04

Журнал технической физики, т. 66, в. 9, 1996

## РАСЧЕТ ЧАСТОТЫ ИОНИЗАЦИИ В ГЕЛИИ ПРИ СИЛЬНЫХ ОДНОРОДНЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

© А.А.Абрамов, А.И.Мащенко, В.Ф.Папакин, Г.Н.Толмачев

Институт общей физики РАН,  
117942 Москва, Россия  
(Поступило в Редакцию 3 августа 1995 г.)

Частота ионизации атомов электронами  $\nu_i$  является параметром, непосредственно характеризующим динамику поведения заряженных частиц во времени. Она входит в уравнение непрерывности для электронов, связывающее суммарную скорость изменения электронной концентрации с механизмом их генерации [1],

$$dn/dt = \nu_i n, \quad (1)$$

где  $n$  — концентрация электронов.

При этом параметр  $\nu_i$  непосредственно вычисляется с помощью функции распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ)  $f(\varepsilon)$

$$\nu_i = \int_0^{\infty} \sigma_i(\varepsilon) v(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon,$$

где  $\sigma_{i0}(\varepsilon)$  — сечение ионизации,  $v$  — скорость.