

07.2

Моделирование профилей распределения алюминия в эпитаксиальном слое в системе Al–Ga–As–Sn

© Н.С. Потапович, В.П. Хвостиков, О.А. Хвостикова, А.С. Власов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: nspotapovich@mail.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 7 сентября 2023 г.

В окончательной редакции 11 октября 2023 г.

Принято к публикации 13 октября 2023 г.

Проведено моделирование концентрационных профилей слоев n -AlGaAs, легированных оловом, при выращивании методом жидкофазной эпитаксии из расплава ограниченной высоты. Показана возможность получения толстых градиентных волноводных слоев из расплавов с различным содержанием олова. Исследовано влияние состава растворителя на эффект инверсии градиента профиля алюминия.

Ключевые слова: AlGaAs, фазовые диаграммы, жидкофазная эпитаксия, фотоэлектрические преобразователи.

DOI: 10.61011/PJTF.2024.01.56924.19721

Как известно, в системах, где твердые растворы образуются при замещении галлия алюминием, наблюдаются высокие значения коэффициента распределения алюминия. Это свойство позволяет получать твердые растворы AlGaAs при достаточно низких температурах в широком диапазоне составов. Такие гетероструктуры позволяют получать довольно толстые слои (более $40 \mu\text{m}$) со значительным градиентом состава или, наоборот, однородные по всей толщине слои, используемые в светодиодах и фотоэлектрических преобразователях с вертикальным p – n -переходом. При создании приборов на основе толстых слоев AlGaAs (как однородных, так и градиентных), выращенных в широком диапазоне температур, необходимо также решить проблему получения однородных по уровню и типу легирования слоев. Так, рост из галлиевого расплава может привести к получению слоев AlGaAs как n -типа, так и p -типа. При температуре роста более 850°C слои AlGaAs имеют p -тип проводимости, а при $T < 850^\circ\text{C}$ — n -тип [1,2]. Рост из расплавов, обогащенных оловом, позволяет надежно получать структуры n -AlGaAs при высоких температурах эпитаксии (более 850°C), но значительно смещает фазовые равновесия и соответственно изменяет профиль распределения состава по толщине полученного слоя.

Моделирование роста эпитаксиальных слоев методом жидкофазной эпитаксии из расплава ограниченного объема проводилось при помощи уравнения Пфана [3]. Подставляя в данное уравнение $X_{\text{Al}}^S = X_{\text{AlAs}}/2$ и $X_{\text{As}}^S = 1$ [4,5], можно представить его в виде дифференциального уравнения с начальными условиями $X_{\text{Al}}^L = X_{\text{Al}0}^L$ при $T = T_0$:

$$dX_{\text{Al}}^L/dT = dX_{\text{As}}^L/dT [(0.5X_{\text{AlAs}} - X_{\text{Al}}^L)/(1 - X_{\text{As}}^L)], \quad (1)$$

где X_{AlAs} — содержание алюминия в твердой фазе, X_{As}^L и X_{Al}^L — содержание мышьяка и алюминия в жидкой фазе.

Параметры дифференциального уравнения (X_{AlAs} , X_{As}^L и dX_{As}^L/dT) определялись исходя из кривых ликвидуса и солидуса, рассчитанных при помощи модели квазирегулярных растворов для $T = 1000$ – 500°C по уравнениям, приведенным в работах [6,7]. Уравнение (1) интегрировалось методом Рунге–Кутты четвертого порядка с шагом по температуре 0.1°C .

Градиентные слои AlGaAs выращивались методом жидкофазной эпитаксии из расплава Ga–Sn с содержанием олова 0.2 mol. fraction. Растущий слой кристаллизовали на подложках GaAs ориентации (100) в потоке очищенного водорода. Эпитаксиальный рост слоев осуществлялся в графитовой cassette поршневого типа с ограниченной высотой расплава ($h = 1.5 \text{ mm}$). Скорость охлаждения раствора-расплава при эпитаксии не превышала $1^\circ\text{C}/\text{min}$. Температура начала эпитаксиального роста составляла $T_0 = 935^\circ\text{C}$ при начальном содержании алюминия в твердой фазе $X_{\text{AlAs}0} = 0.58$ для первого образца (рис. 1, а, кривая 2, кружки) и $X_{\text{AlAs}0} = 0.53$ для второго образца (рис. 1, а, кривая 2, квадраты). Температура окончания роста и толщина слоя для первого образца составили 860°C и $40 \mu\text{m}$, а для второго образца — 800°C и $80 \mu\text{m}$ соответственно.

Экспериментальные значения состава X_{AlAs} твердого раствора AlGaAs определяли с помощью метода рамановской спектроскопии. Спектры измерялись в геометрии обратного рассеяния с торца. Возбуждение производилось лазером с длиной волны излучения 532 nm через объектив с увеличением $80\times$.

Как видно из рис. 1, а, общий характер распределения состава по толщине эпитаксиального слоя AlGaAs в процессе эпитаксиального выращивания из расплава Ga–Sn (концентрация Sn составляет 0.2 mol. fraction) сохраняет вид, типичный для роста из расплавов с замещением галлия алюминием. В данном случае также сохраняется инверсия градиента профиля алюминия

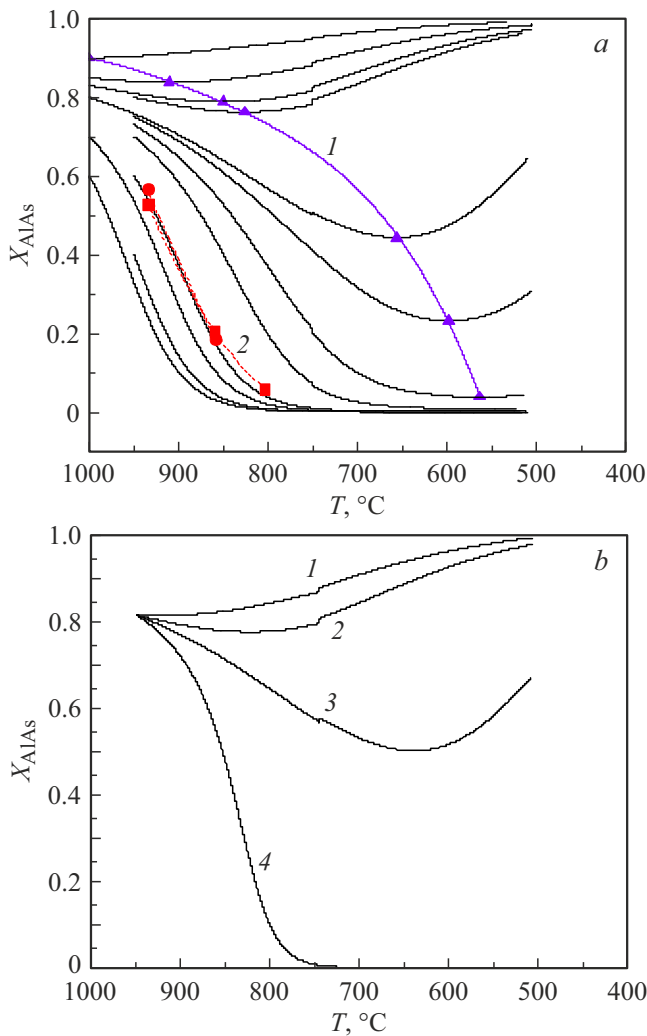


Рис. 1. Изменение состава эпитаксиального слоя AlGaAs в процессе роста из расплава Ga–Sn. *a* — при концентрации Sn, равной 0.2 mol. fraction (1 — инверсная кривая, 2 — экспериментальные профили); *b* — при начальных условиях ($T_0 = 950^\circ\text{C}$, $X_{\text{AlAs}0} = 0.8$) и концентрации олова $X_{\text{Sn}} = 0$ (1), 0.2 (2), 0.3 (3) и 0.4 mol. fraction (4).

(увеличение содержания алюминия в твердом растворе в процессе выращивания вместо снижения) из-за того, что уменьшение количества неметалла в жидкой фазе сопровождается увеличением коэффициента распределения алюминия при охлаждении ростового раствора-расплава [5,8]. Кривая 1 на рис. 1, *a* (инверсная кривая) обозначает смену градиента профиля алюминия в процессе эпитаксиального роста. Полученные профили распределения в экспериментальных образцах (точки и кривые 2 на рис. 1, *a*) довольно хорошо согласуются с теорией. Некоторые расхождения в области низких концентраций алюминия ($X_{\text{AlAs}} < 0.2$) могут объясняться высокой погрешностью метода исследования в этой области составов.

Добавление олова в ростовой расплав уже в количестве 0.4 mol. fraction приводит к смене характера рас-

пределения состава твердого раствора. В соответствии с результатами расчетов, представленных на рис. 1, *b*, при выращивании слоев AlGaAs из расплава Ga–Sn (при начальных условиях $T_0 = 950^\circ\text{C}$, $X_{\text{AlAs}0} = 0.8$), изменяя концентрацию олова, можно добиться роста как слоев с возрастающим содержанием алюминия, так и градиентных слоев со снижением содержания алюминия (вплоть до роста слоя GaAs).

Задача получения градиентного волноводного слоя с плавным изменением состава *n*-типа проводимости без резких скачков уровня легирования по всей толщине (не менее $40\ \mu\text{m}$) может потребовать последовательного роста из нескольких расплавов с разной концентрацией донорной примеси [2]. При этом следует четко отслеживать границу инверсии градиента профиля алюминия. По результатам моделирования изменения состава эпитаксиального слоя AlGaAs в процессе эпитаксиального роста с различной концентрацией олова в расплаве ($X_{\text{Sn}} = 0\text{--}0.4$ mol. fraction) были определены инверсные кривые (рис. 2). Для наглядности на рисунке представлена область 4, соответствующая составам и температурам, наиболее подходящим для выращивания толстых ($d > 40\ \mu\text{m}$) градиентных слоев AlGaAs.

Как видно, в случае роста из расплава с содержанием олова менее 0.2 mol. fraction можно попасть в область инверсного роста AlGaAs (где состав твердого раствора при снижении температуры растет, а не снижается), что следует учитывать при планировании экспериментов. На основе проведенных исследований в работах [9,10] были получены и исследованы мощные фотоэлектрические преобразователи с вертикальным *p–n*-переходом, активной областью GaAs и толстым волноводным слоем $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($d \approx 50\ \mu\text{m}$), выращенным методом жидкофазной эпитаксии.

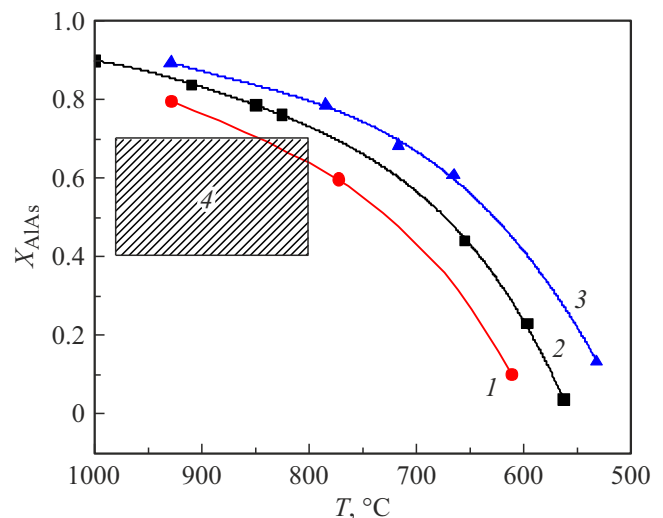


Рис. 2. Инверсные кривые при различном содержании олова в растворе-расплаве. $X_{\text{Sn}} = 0$ (1), 0.2 (2) и 0.4 mol. fraction (3). Область 4 — начальные составы и температуры, используемые для роста градиентных слоев AlGaAs.

Таким образом, в работе проведено моделирование роста градиентных слоев в системе Al–Ga–As–Sn для различного содержания олова в расплаве. Экспериментально подтверждена возможность применения предложенного метода расчета для роста относительно толстых слоев ($d > 40 \mu\text{m}$) AlGaAs с градиентом состава или однородных по всей толщине. Определено изменение инверсных кривых градиента профиля алюминия при добавлении олова в расплав вплоть до 0.4 mol. fraction и показано смещение границы инверсии в область с более высоким содержанием алюминия в твердом слое. Полученные результаты могут быть использованы для создания фотоэлектрических преобразователей с вертикальным p – n -переходом.

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-19-00057 (<https://rscf.ru/project/22-19-00057/>).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] X. Zhao, K.H. Montgomery, J.M. Woodall, J. Electron. Mater., **43** (11), 3999 (2014). DOI: 10.1007/s11664-014-3340-x
- [2] V. Khvostikov, O. Khvostikova, N. Potapovich, A. Vlasov, R. Sali, Heliyon, **9** (7), e18063 (2023). DOI: 10.1016/j.heliyon.2023.e18063
- [3] W.G. Pfann, *Zone melting* (Wiley, 1958). DOI: 10.1107/S0365110X5900130X
- [4] В.М. Андреев, Л.М. Долгинов, Д.Н. Третьяков, *Жидкостная эпитаксия в технологии полупроводниковых приборов* (Сов. радио, М., 1975).
- [5] В.А. Елюхин, С.Ю. Карпов, Е.Л. Портной, Д.Н. Третьяков, Письма в ЖТФ, **4** (11), 629 (1978).
- [6] M.B. Panish, J. Appl. Phys., **44** (6), 2667 (1973). DOI: 10.1063/1.1662631
- [7] X. Кейси, М. Паниш, *Лазеры на гетероструктурах* (Мир, М., 1981), т. 2, гл. 6. [H.C. Casey, M.B. Panish, *Heterostructure lasers* (Academic Press, 1978), pt B, ch. 6. DOI: 10.1016/B978-0-12-163102-4.50009-9].
- [8] M. Dombrougov, Microsyst. Electron. Acoust., **24** (1), 6 (2019). DOI: 10.20535/2523-4455.2019.24.1.160164
- [9] A. Panchak, V. Khvostikov, P. Pokrovskiy, Opt. Laser Technol., **136**, 106735 (2021). DOI: 10.1016/j.optlastec.2020.106735
- [10] V.P. Khvostikov, A.N. Panchak, O.A. Khvostikova, P.V. Pokrovskiy, IEEE Electron Dev. Lett., **43** (10), 1717 (2022). DOI: 10.1109/LED.2022.3202987