

УДК 539.291.1

В.О. Воронін[#], С.К. Губа[#], М.О. Литвин^{*}[#]Національний Університет "Львівська політехніка",

Кафедра напівпровідникової електроніки

^{*}Фізико-механічний інститут імені Г.В. Карпенка НАН України

ОДНОКОМПОНЕНТНА МОДЕЛЬ ЕПІТАКСІЙНОГО РОСТУ GaAs З ГАЗОВОЇ ФАЗИ ПРИ ПЕРЕХІДНОМУ РЕЖИМІ

© Воронін В.О., Губа С.К., Литвин М.О., 2002

Описується математична модель росту арсеніду галію в хлоридній газотранспортній системі в режимі, при якому швидкість росту залежить від швидкості масодоставки і активаційних процесів на поверхні підкладки

The mathematical model of growth of gallium arsenide in chlorid gas transport system in a mode at which growth rate depends on speed of mass bringing and activation processes on a surface of a substrate is described

Вступ

Останнім часом у напівпровідниковій електроніці щораз більше зростає роль напівпровідникових матеріалів типа A^3B^5 і насамперед арсеніду галію GaAs. Зацікавленість до цього матеріалу викликана тим, що він доповнює властивості широко використовуваних елементарних напівпровідників Si, Ge у більшому степені, ніж будь-який інший відомий напівпровідник.

Велика ширина забороненої зони і висока рухливість електронів допускають можливість роботи арсенідгалієвих приладів в області високих температур і високих частот [1].

В сучасній технології процеси епітаксії займають одне з провідних місць у виробництві інтегральних мікросхем і більшості типів дискретних напівпровідникових приладів [2].

Перспективним шляхом, що дозволяє досліджувати процеси росту шарів і оптимізацію технології, є числове моделювання фізико-хімічних процесів і кінетики росту сполук A^3B^5 в газоепітаксійному реакторі.

Епітаксійний ріст у газотранспортних системах визначається процесами доставки газовим потоком реагуючих компонент і кінетикою процесів на підкладці. Класичний підхід до моделювання складних процесів газозфазного осадження з багатокомпонентної газової суміші базується на положеннях про лімітуючу стадію процесу [3], а саме йдеться про активаційні процеси, коли основним механізмом є кінетика поверхневих реакцій [4], або про дифузійний масоперенос [5].

Одною із основних тенденцій у розвитку технології епітаксійного росту у хлорид-утримуючих газозфазних системах є зниження робочої температури і використання ізотермічності режиму росту шарів A^3B^5 [6]. Таке отримання тонких шарів арсеніду галію відповідає перехідному режиму (дифузійно - кінетичний).

У цій роботі пропонується математична модель росту GaAs, лімітована одною із компонент хлоридної газотранспортної системи при перехідному режимі росту.

1. Формулювання задачі. Граничні умови

Явний вид залежності швидкості росту $W(C_k, T)$ можна отримати, досліджуючи кінетику ростових процесів на поверхні. Цікавим є найпростіший випадок газотранспортної системи, що складається з однієї ростової компоненти з концентрацією C і лінійною ростовою кінетикою:

$$W = \Omega k(C - C_E), \quad (1)$$

де C_E - рівноважна концентрація, k - кінетичний коефіцієнт, Ω - молекулярний об'єм твердої фази. Відзначимо, що (1) є справедливим також для систем з довільною залежністю $W(C)$ для достатньо малих відхилень від рівноваги, причому:

$$\Omega k = \left(\frac{\partial W}{\partial C} \right)_{C=C_E} \quad (2)$$

В розглядуваному випадку гранична умова рівняння

$$D_i \Delta C_i - \bar{V} \nabla C_i = 0, \quad (3)$$

де концентрація реагуючих компонент $C_i' = C_i - \bar{C}_i$ а $\bar{C}_i = (C_{i1} + C_{i2})/2$, D_i - коефіцієнт об'ємної дифузії i -ої компоненти набуває вигляду

$$-D \left. \frac{\partial C}{\partial X} \right|_{\text{підкл}} = k(C - C_E). \quad (4)$$

Щоб отримати безрозмірні параметри, що характеризують поведінку системи, для полегшення введемо такі безрозмірні параметри:

швидкість:

$$\tilde{V} = V / \bar{V}; \quad (5)$$

координати:

$$\tilde{X} = X / H, \quad \tilde{Y} = Y / H; \quad (6)$$

концентрацію:

$$C = (C - C_E) / (C_B - C_E), \quad (7)$$

де C_B - концентрація компонент на вході;

швидкість росту:

$$\tilde{W} = \tilde{C} k H / D; \quad (8)$$

Враховуючи ці змінні, рівняння (3) і граничні умови набувають вигляду

$$C_i \Big|_{y \rightarrow \infty} \rightarrow C_{iB}; \quad (9)$$

$$\left. \frac{dC_i}{dX} \right|_{\text{СТІНКА}} = 0; \quad (10)$$

$$\Delta \tilde{C} - Pe \tilde{V} \nabla \tilde{C} = 0, \quad (11)$$

де

$$\tilde{V} = 6\tilde{X}(1 - \tilde{X}); \quad (12)$$

$$\tilde{C} \Big|_{\tilde{y} \rightarrow \infty} \rightarrow 1; \quad (13)$$

$$\left. \frac{d\tilde{C}}{d\tilde{X}} \right|_{\text{СТІНКА}} = 0; \quad (14)$$

$$\left. \frac{d\tilde{C}}{d\tilde{X}} \right|_{\text{підкл}} = -S\tilde{C}. \quad (15)$$

Тут безрозмірна потужність стоку $S = kH/D$ визначає відношення висоти каналу реактора H до характерного розміру області збіднення біля підкладки D/k . Число Пекле $Pe = \bar{V}H/D$, що характеризує співвідношення дрейфового $\bar{V}C_{\text{в}}$ і дифузійного $DC_{\text{в}}/H$ потоків в об'ємі реактора.

2. Обговорення результатів

Числове розв'язання рівняння (11) з граничними умовами (13 – 15) дозволяє знайти залежності швидкості росту для різних значень безрозмірних параметрів.

На рис.1 показані залежності швидкості росту $W(y)$ для різних значень S і фіксованої швидкості потоку ($Pe = 2$). При малих значеннях S збіднення потоку є незначним і режим близький до кінетичного: $W(y) \approx \text{const} \approx S$. В міру збільшення S збіднення газової фази зростає. Профіль швидкості росту $W(y)$ стає все більш неоднорідним і при великих S прямує до граничного значення безрозмірних параметрів.

При великих значеннях S і фіксованому Pe розв'язок рівняння (11) можна шукати в формі ряду за малим параметром $S^{-1} \rightarrow 0$

$$\tilde{C}(\tilde{X}, \tilde{Y}, S) = \sum_{j=0} S^{-j} \tilde{C}^{(j)}(\tilde{X}, \tilde{Y}), \quad (16)$$

де $\tilde{C}^{(j)}$ задовольняє рівняння, отримане при підстановці (16) в (11):

$$\Delta \tilde{C}^{(j)} - Pe \bar{V} \nabla \tilde{C}^{(j)} = 0. \quad (17)$$

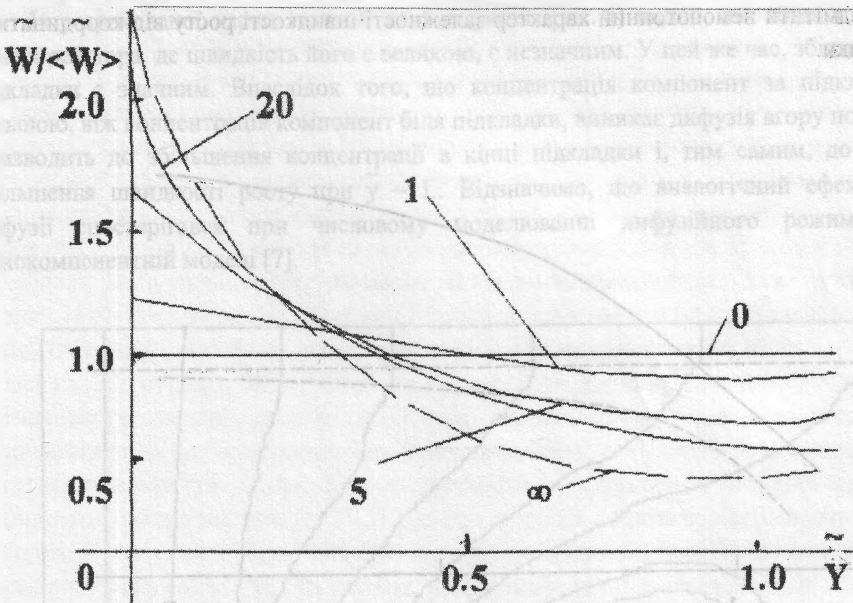


Рис. 1. Зміна швидкості росту вздовж підкладки для різних значень числа S

Граничну умову (15) також потрібно розкласти по S^{-1} . При нульовому порядку отримаємо

$$\tilde{C}^{(0)}|_{\text{підкл}} = 0, \quad (18)$$

тобто підкладка знаходиться в локальній хімічній рівновазі з газом. Швидкість росту в нульовому наближенні, згідно з (1) дорівнює нулю. Щоб її знайти необхідно записати граничну умову в першому порядку:

$$\tilde{C}^{(1)} = - \left. \frac{d\tilde{C}^{(0)}}{d\tilde{X}} \right|_{\text{підкл}}, \quad (19)$$

що з врахуванням (8) дає

$$\tilde{W} = S\tilde{C} = - \left. \frac{d\tilde{C}^{(0)}}{d\tilde{X}} \right|_{\text{підкл}}. \quad (20)$$

Отже, для знаходження граничного значення швидкості росту $W(y)$ при $S \rightarrow \infty$ потрібно розв'язати рівняння (11) з граничною умовою (18) та із отриманого розв'язку знайти $W(y)$ за формулою (20). Сформульоване наближення, при $S \rightarrow \infty$ переходить в дифузійне. Відзначимо, що в отриманому результаті існують такі особливості дифузійного наближення як локальна рівновага газової фази з поверхнею і незалежність швидкості росту від кінетичної характеристики поверхні k .

Граничні випадки можна спостерігати і на залежності середньої швидкості росту $\tilde{W} = \int_0^r dy \overline{W} L^{-1}$ від числа Пекле (рис. 2 та рис. 3). При малих значеннях Pe більша частина речовини із потоку встигає вбудуватися у підкладку. При цьому \tilde{W} практично пропорційно до потоку речовини, тобто $\tilde{W} \sim Pe$. При $Pe \rightarrow \infty$ збіднення потоку дуже мале і $\tilde{W} \approx S$, тобто не залежить від швидкості потоку. Така поведінка типова для кінетичних режимів росту. Також треба відмітити немонотонний характер залежності швидкості росту від координати вздовж підкладки.

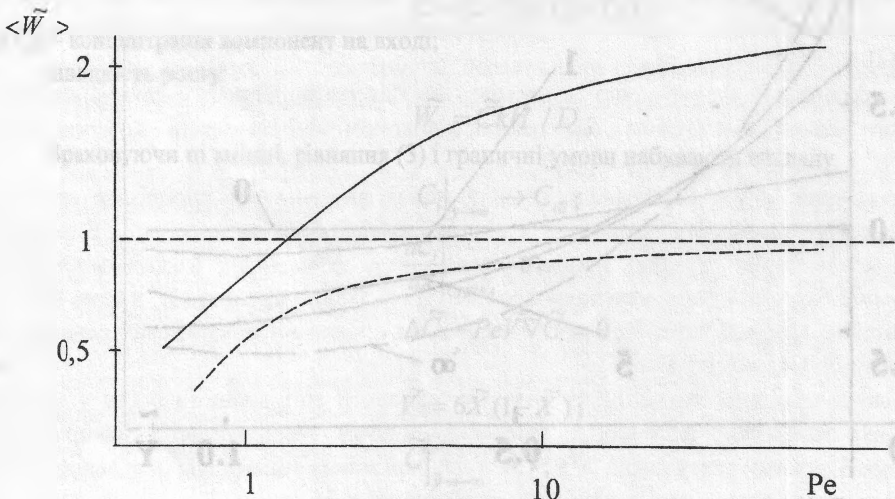


Рис. 2. Залежність середньої швидкості росту від числа Пекле при $S=1$ (пунктирна лінія) і $S=5$ (суцільна лінія)

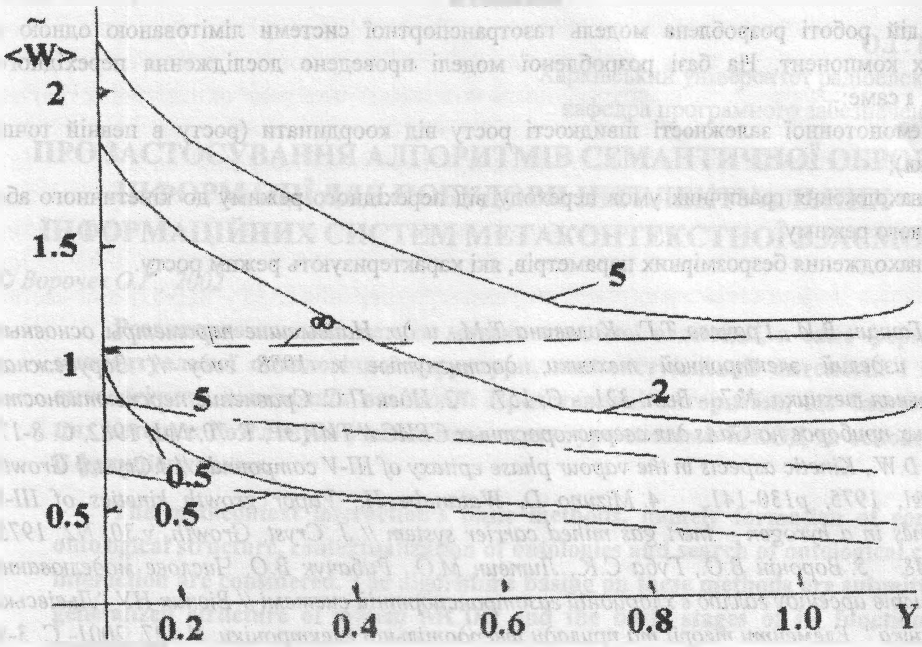


Рис. 3. Зміна швидкості росту вздовж підкладки (цифрами позначено значення числа Пакле PE)

Із розрахованої карти ізолій концентрацій (рис. 4) видно, що збіднення потоку в центрі реактора, де швидкість його є великою, є незначним. У цей же час, збіднення вздовж підкладки є значним. Внаслідок того, що концентрація компонент за підкладкою стає більшою, ніж концентрація компонент біля підкладки, виникає дифузія вгору по потоку, яка призводить до збільшення концентрації в кінці підкладки і, тим самим, до локального збільшення швидкості росту при $y \sim L$. Відзначимо, що аналогічний ефект зворотної дифузії спостерігався при числовому моделюванні дифузійного режиму росту в однокомпонентній моделі [7].

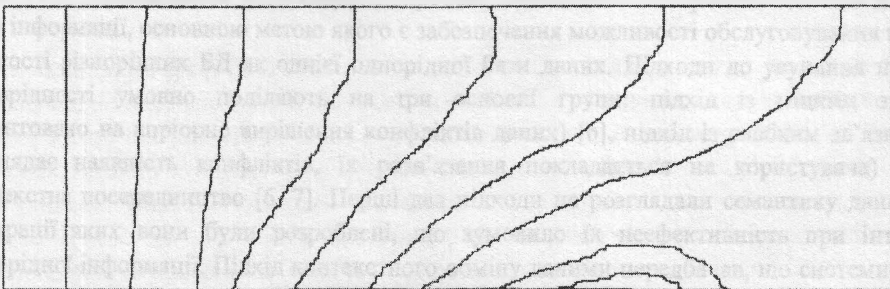


Рис. 4. Ізоконцентраційні лінії в реакторі

Висновки

У цій роботі розроблена модель газотранспортної системи лімітованою одною з ростових компонент. На базі розробленої моделі проведено дослідження перехідного режиму, а саме:

- немонотонної залежності швидкості росту від координати (росту в певній точці підкладки);
- знаходження граничних умов переходу від перехідного режиму до кінетичного або дифузійного режиму;
- знаходження безрозмірних параметрів, які характеризують режим росту.

1. Ганкин В.И., Грачева Т.Г., Колявина Т.М., и др. *Наивысшие параметры основных классов изделий электронной техники, достигнутые к 1988 году* // *Зарубежная электронная техника. №7. - Вып. 321. - С. 157.* 2. Иден П.С. *Сравнение перспективности различных приборов на GaAs для сверхскоростных СБИС* // *ТИИЭР, Т. 70, №1, 1982, С. 8-17.* 3. Shaw D.W., *Kinetic aspects in the vapour phase epitaxy of III-V compounds* // *J.Crystal Growth, v.31, №1, 1975, p130-141.* 4. Mizuno D, Watanabe H., *Vapor growth kinetics of III-V compounds in a hydrogen – inert gas mixed carrier system* // *J. Cryst. Growth, v.30, N2, 1975, p.240-248.* 5. Воронін В.О., Губа С.К., Лутвин М.О., Рубачук В.О. *Числове моделювання росту шарів арсеніду галію в хлоридній газотранспортній системі* // *Вісник НУ "Львівська політехніка", Елементи теорії та прилади твердотільної електроніки, N 427, 2001- С. 3-9.* 6. Keckes A., Binder H., Gofmann G., Koukitu A., Schonherr E. *Growth of GaP doping superlattices by isothermal vapor phase epitaxy* // *Crystal Properties and Preparation vol.32-34, 1991 P. 520-525.* 7. Bulsary A.B., Orasen M.E., Goice J. *The Influence of Axial on Convective Heat and Mass Transfer in a Horizontal CVD Reactor* // *J. Crystal Growth. N1-2, V.92, 1988 P. 294 – 310.*

