

01; 03; 11

© 1991

ОБ УСЛОВИЯХ ОБРАЗОВАНИЯ
ГАЛЛИЙ-СТАБИЛИЗИРОВАННОЙ ПОВЕРХНОСТИ $GaAs$ (100)
В ПРОЦЕССЕ ЭПИТАКСИИ ИЗ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПУЧКОВС.Ю. Карпов, Ю.В. Ковальчук,
Г. де ла Круз, В.Е. Мячин,
Ю.В. Погорельский

В настоящее время состояние поверхности полупроводников в условиях сверхвысокого вакуума принято характеризовать с помощью поверхностной фазовой диаграммы [1–3]. В случае $GaAs$ (100) фазовая диаграмма в координатах „падающий поток тетрамеров (димеров) мышьяка – обратная температура” представляет собой ряд областей, каждой из которых соответствует определенная реконструкция поверхности. В процессе эпитаксии из молекулярных пучков выращивание $GaAs$, как правило, осуществляется на мышьяк-стабилизированной поверхности, имеющей реконструкцию (2×4) . При повышении температуры (и сохранении неизменным потока мышьяка) мышьяк-стабилизированная поверхность через промежуточную поверхностную структуру (1×1) переходит в галлий-стабилизированную поверхность с реконструкцией (4×2) .

Обобщая ряд экспериментальных наблюдений, М. Паниш заметил, что высокотемпературная граница перехода к галлий-стабилизированной поверхности определяется величиной потока насыщенных паров мышьяка над жидкой фазой, находящейся в равновесии с кристаллом [1]. Это означает, что галлий-стабилизированная поверхность неустойчива относительно образования на ней жидкости. Тем самым, граница поверхностной структуры (4×2) очерчивает на фазовой диаграмме область, запрещенную для эпитаксиального роста кристаллического $GaAs$.

В данной работе предложен квазитермодинамический метод расчета границы области (4×2) поверхностной фазовой диаграммы $GaAs$ (100), позволяющий описать как высокотемпературный, так и низкотемпературный ее участки. Этот метод использован для анализа возможной модификации вида фазовой диаграммы при потоках исходных компонент, сравнимых с потоками конгруэнтного испарения $GaAs$.

Будем исходить из следующих предположений: (а) – на поверхности устанавливается стационарный режим послойного роста, скорость которого ограничивается только поступлением материала из молекулярных пучков; (б) – эпитаксиальная кристаллизация снимает пересыщение на поверхности, так что десорбированные потоки галлия и мышьяка соответствуют равновесным давлениям из паров

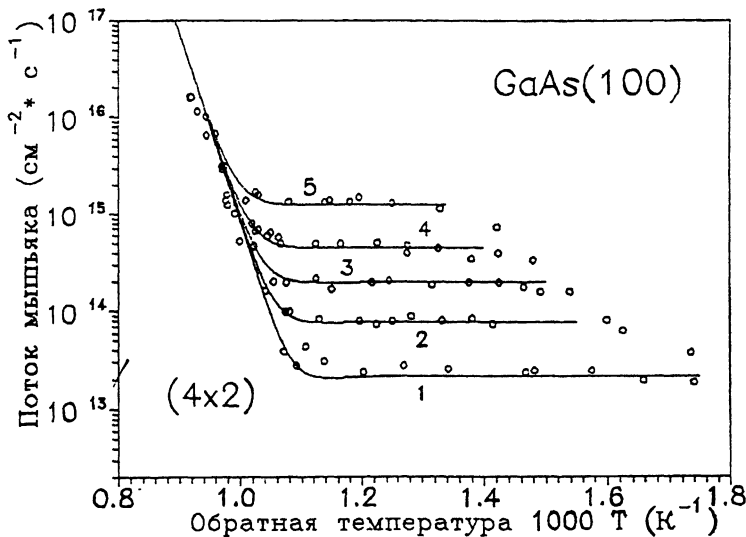


Рис. 1. Расчетная зависимость положения границы области (4x2) при различных падающих потоках галлия: 1 - 0.07 МС/с, 2 - 0.25 МС/с, 3 - 0.64 МС/с, 4 - 1.45 МС/с, 5 - 4.0 МС/с. Точки - экспериментальные данные работы [3].

при данной температуре; (в) - граница области (4x2) определяется трехфазным равновесием „пар-жидкость-кристалл“, при котором давления компонент зависят только от температуры поверхности.

Запишем уравнения баланса масс для галлия и мышьяка:

$$F_{Ga} - F_{Ga}^d = \sigma \cdot v, \quad (1)$$

$$4(\alpha_{As} F_{As_4} - F_{As_4}^d) - 2F_{As_2}^d = \sigma \cdot v, \quad (2)$$

где F_{Ga} и F_{As_4} - падающие на поверхность потоки исходных компонент; F_{Ga}^d , $F_{As_2}^d$ и $F_{As_4}^d$ - десорбированные потоки; v - скорость эпитаксиального роста, измеряемая количеством монослоев GaAs в единицу времени; $\sigma = 6.245 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ - плотность узлов анионной или катионной подрешеток на поверхности GaAs (100); α_{As} - коэффициент прилипания тетрамеров мышьяка, который на границе области (4x2) равен 0.5 [4] (коэффициент прилипания галлия в рассматриваемом температурном интервале равен единице, поэтому в (1) он не учитывается). При заданном потоке галлия F_{Ga} величина F_{As_4} фактически представляет собой минимальный поток, необходимый для компенсации потерь мышьяка за счет его десорбции с поверхности и кристаллизации твердой фазы.

Десорбированные потоки F^d связаны с парциальными давлениями десорбированных компонент P обычными соотношениями:

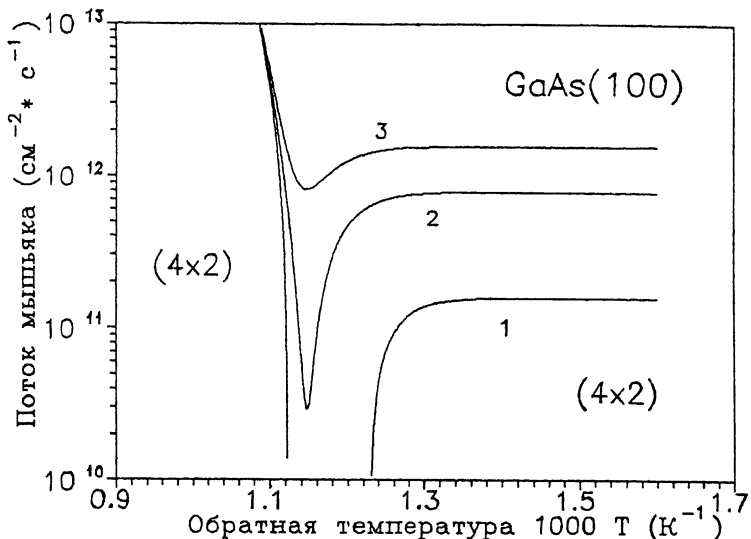


Рис. 2. Расчетная зависимость положения границы области (4x2) при различных падающих потоках галлия: 1 - $0.5 \cdot 10^{-3}$ MC/c, 2 - $2.5 \cdot 10^{-3}$ MC/c, 3 - $5.0 \cdot 10^{-3}$ MC/c.

$$F^d = p / (2\pi kMT)^{1/2}, \quad (3)$$

где M - масса молекулы (атома) пара; T - температура поверхности; k - постоянная Больцмана. В качестве давлений десорбированных компонент мы возьмем значения их парциальных давлений в случае трехфазного равновесия „пар-жидкость-кристалл“. В последнем случае давление паров галлия [5] может быть экстраполировано выражением:

$$P_{Ga} = 3.264 \cdot 10^8 \cdot \exp(-31904/T) \quad (T_{op}). \quad (4)$$

Парциальные давления десорбированных димеров и тетрамеров мышьяка удобно рассчитывать, исходя из соотношений

$$P_{Ga} \cdot P_{As_2}^{1/2} = R_{GaAs}, \quad (5)$$

$$P_{As_2} \cdot P_{As_4}^{-2} = R_{As}, \quad (6)$$

где R_{GaAs} и R_{As} - константы равновесия реакций образования $GaAs$ и тетрамеров мышьяка, зависящие только от температуры [5, 6]:

$$R_{GaAs} = 3.460 \cdot 10^{15} \cdot \exp(-53817/T) \quad (T_{op}^{3/2}), \quad (7)$$

$$R_{As} = 8.170 \cdot 10^{-10} \cdot \exp(26474/T) \quad (\text{Тор}^{-1}). \quad (8)$$

Решая систему уравнений (1)-(2) при заданном внешнем потоке F_{Ga} , можно получить величину F_{As} , температурная зависимость которой в нашем случае соответствует границе области (4x2).

На рис. 1 точками представлены экспериментальные данные по положению границы области (4x2), полученные при разных падающих потоках галлия [3]. Сплошными кривыми показаны результаты расчета по формулам (1)-(8). Как видно, расчетные данные достаточно хорошо описывают поведение фазовой границы. При высоких температурах граница области (4x2) определяется потоком мышьяка, компенсирующим его десорбцию с поверхности. При низких температурах, когда десорбция становится неэффективной, поступающий на поверхность поток мышьяка находится в стехиометрическом соотношении с падающим потоком галлия.

При малых падающих потоках галлия вид границы области (4x2) существенно изменяется (см. рис. 2). Как видно, вблизи температуры конгруэнтного испарения $GaAs$ (~ 903 К согласно расчету) появляется провал и даже (при очень малых F_{Ga}) - область, в которой фазовая граница отсутствует вовсе. Физическая причина такого поведения заключается в следующем. Ниже температуры конгруэнтного испарения десорбированный поток галлия превышает десорбированный поток мышьяка, то есть десорбция приводит к накоплению на поверхности элемента пятой группы. Если скорость этого накопления достаточна для компенсации падающего на поверхность потока галлия, образования жидкой фазы не происходит, и галлий-стабилизированная поверхность не возникает. Уменьшение температуры приводит к падению скорости накопления избыточного мышьяка, в результате чего компенсация падающего потока галлия не наступает, и при низких температурах граница области (4x2) появляется вновь. В случае $GaAs$ этот эффект может наблюдаться лишь при чрезвычайно низких F_{Ga} (на 2-3 порядка меньших потока, обеспечивающего характерную скорость роста ~ 1 мкс/ч). Однако для других материалов, например, для $AlGaAs$ или твердых растворов $AlGaAs$, имеющих более высокое давление насыщенных паров при температуре конгруэнтного испарения, можно ожидать изменения вида границы области (4x2) от представленного на рис. 1 к изображенному на рис. 2 уже при типичных ростовых потоках.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] P a n i s h M.B. // J. Electrochem. Soc. 1980. V. 127. N 12. P. 2729-2733.
 [2] B a i l l a r g e o n J.N., C h e n g K.Y., H s i e h K.C. // Appl. Phis. Lett. 1990. V. 56. N 22. P. 2201-2203.

- [3] Newstead S.M., Kubiak R.A.A., Parker E.H.C. // J. Cryst. Growth. 1987. V. 81. N 1-4. P. 49-54.
- [4] Tsao J.Y., Brennan T.M., Hammons B.E. // Appl. Phys. Lett. 1988 V. 53. N 4. P. 288-290.
- [5] Arthur J.R. // J. Phys. Solids. 1967. V. 28. N 11. P. 2257-2267.
- [6] Chen J.Y., Chatillon C. // J. Cryst. Growth, 1990. V. 106. N 3. P. 543-552.

Физико-технический
институт им. А.Ф. Иоффе
АН СССР, С.-Петербург

Поступило в Редакцию
4 ноября 1991 г.