

05

Применение потенциала с осевой симметрией при моделировании роста кристаллов из жидкой фазы

© Е.А. Шуников, Ю.П. Хухрянский, И.Н. Арсентьев

Воронежский государственный технический университет

E-mail: eu_sh@mail.ru

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

E-mail: dmitry.vinokurov@pop.ioffe

Поступило в Редакцию 2 августа 2004 г.

Разработана модель процесса роста кристалла полупроводникового соединения типа $A^{III}B^V$ из раствора-расплава. Предложен новый потенциал парного взаимодействия между атомами кристалла и атомами жидкой фазы, обладающий осевой симметрией. Проведены эксперименты в соответствии с разработанной моделью, в результате которых определена плотность потока осаждающихся из растворов атомов на поверхность кристалла в начальной стадии.

Получение монокристаллов полупроводников с заданными свойствами из жидкой фазы является центральной проблемой современной твердотельной электроники. Решение этой задачи предполагает знание функции межатомного взаимодействия, которая составляет основу для построения модели роста полупроводника из жидкой фазы.

Нами предложен новый вид потенциала, который позволяет учесть особенности распределения атомов жидкости у поверхности кристалла.

Методом молекулярной динамики были проведены исследования роста кристалла из жидкой фазы с использованием данного потенциала. В качестве объекта исследования рассматривался раствор фосфора в галлии и рост из жидкой фазы кристалла фосфида галлия. В работе предполагалось, что взаимодействие между атомами раствора описывается потенциалами Леннарда–Джонса и Борна–Майера, обладающими сферической симметрией:

1) взаимодействие Ga–P

$$V(r) = \frac{D}{n-m} \left[m \left(\frac{r_0}{r} \right)^n - n \left(\frac{r_0}{r} \right)^m \right] + A_{BM} \exp \left(\frac{-r}{a} \right), \quad (1)$$

2) взаимодействие Ga–Ga и P–P

$$V(r) = A_{BM} \exp\left(\frac{-r}{a}\right), \quad (2)$$

где $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, D , n , m , r_0 , a , A_{BM} — постоянные величины [1].

Потенциалы (1) и (2) хорошо описывают взаимодействие в растворе [2,3], поскольку раствор можно считать полностью изотропным, но они не достаточно точно описывают взаимодействие атомов раствора с атомами кристалла, поскольку на межфазной поверхности потенциал частицы не обладает сферической симметрией. Поэтому для описания взаимодействия атомов раствора с подложкой нами был разработан потенциал, обладающий осевой симметрией

$$V(r) = 3.5 \cos\left(\frac{8r}{a}\right) \exp\left(-\frac{16r^2}{a^2}\right) \exp\left(-\frac{(z-a)^2}{a^2}\right), \quad (3)$$

где $r = \sqrt{x^2 + y^2}$.

Потенциал (3), показанный на рис. 1, имеет разное количество экстремумов для различных направлений, что дает возможность более точно учитывать взаимодействие атомов с подложкой. Другой особенностью потенциала (3) является наличие небольшого максимума на расстоянии $r \neq 0$, представляющего собой часть тороидальной поверхности и характеризующего энергию активации процесса диффузии атомов фосфора на поверхности кристалла.

Коэффициенты потенциала выбирались таким образом, чтобы вычисленная плотность потока осаждающихся атомов согласовывалась с экспериментальными данными, полученными при понижении температуры системы по отношению к температуре ликвидуса на 50 К. Основной целью данной работы было исследование влияния этого потенциала на механизм роста кристалла. Применительно к молекулярной динамике можно выделить два основных механизма: осаждение отдельных атомов и кластерный рост (осаждение на подложку происходит группами атомов, кластерами).

Компьютерные эксперименты проводились для разных концентраций фосфора: $x_p = 0.0125$, 0.025 , 0.067 и 0.1 мольных долей. Темпера-

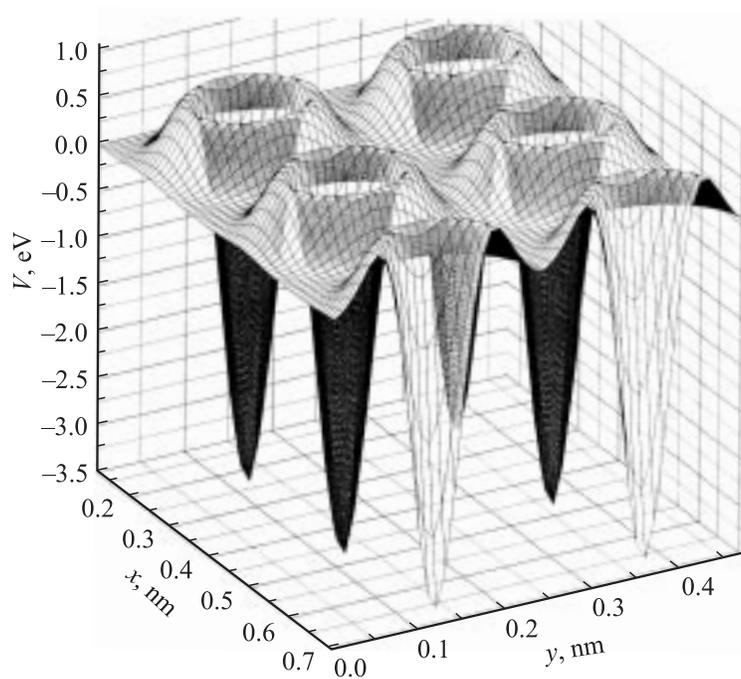


Рис. 1. Общий вид потенциала.

тура ликвидуса системы вычислялась по формуле [4–6]

$$x(T) = \exp\left(-\frac{15992}{T} + 8.67\right), \quad (4)$$

где $x(T)$ — мольная доля фосфора в расплаве галлия.

Отметим, что проведенный нами компьютерный эксперимент с применением предложенного потенциала и соотношения (4) показал, что, как и должно быть, при температуре ликвидуса системы скорость роста, определяемая как разность скоростей осаждения атомов из раствора и растворения поверхности кристалла (подложки), точно равна нулю. Поэтому в дальнейшем основное внимание было уделено зависимости от времени плотности потока осаждающихся из раствора атомов на поверхность подложки при временах меньше 10^{-11} с.

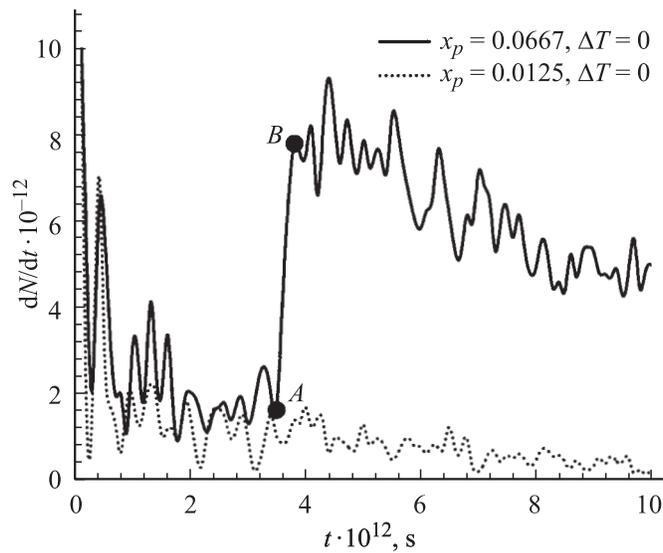


Рис. 2. Скорость роста кристалла для различных концентраций фосфора в переходном процессе при $\Delta T = 0$.

Как показали исследования, при изменении концентрации фосфора x_p в растворе изменяется механизм осаждения атомов на подложке. Так, при x_p в пределах $0.0125 \leq x_p \leq 0.066$ плотность потока атомов, осаждающихся из раствора на поверхность подложки как функция времени $j(t, x_p)$, изменяется скачком (рис. 2, участок AB), после этого наблюдается относительно плавное снижение $j(t)$ во времени. Это связано с тем, что в процессе осаждения пленки осаждаются целые группы атомов, кластеры.

Другая ситуация наблюдается при снижении концентрации фосфора в растворе (рис. 2). В этом случае ($x_p = 0.0125$) реализуется в основном атомарное осаждение.

При понижении температуры ситуация качественно не изменяется, т. е. наблюдается некоторое увеличение плотности потока, но механизм осаждения при этом не меняется.

Однако при уменьшении концентрации фосфора в растворе, как показал компьютерный эксперимент, имеет место и другой процесс —

увеличение как числа кластеров, так и их размера. Так, с увеличением концентрации x_p до 0.1 величина плотности потока осаждающихся атомов уменьшается. Это означает, что при $x_p \approx 0.1$ образуются в основном кластеры стехиометрического состава небольших размеров. Вероятно, что при $x_p \approx 0.1$ фосфор в растворе галлия находится не только в атомарной форме, но и в виде молекул P_2 , которые не входят в состав кластера с галлием. В растворе энергетически более предпочтительно образование кластеров нестехиометрического состава, поскольку кластеры максимальных размеров наблюдались при малых концентрациях фосфора. Отметим также, что при малых концентрациях фосфора максимум на кривой распределения кластеров находится гораздо дальше от подложки, чем для больших. Это объясняется тем, что потенциал подложки препятствует образованию нестехиометрических кластеров.

В процессе расчета наблюдалось увеличение концентрации атомов фосфора вблизи границы, что можно интерпретировать как образование δ -слоя, об этом же свидетельствует и увеличение концентрации кластеров вблизи границы по сравнению с объемом раствора.

В результате проведенных исследований также были вычислены коэффициенты диффузии кластеров и атомов. Вычисленный коэффициент диффузии оказался равным для кластеров — $1.5 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$, для атомов — $8.5 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$.

Таким образом, данная модель с потенциалом, обладающим осевой симметрией, не только позволяет исследовать рост кристалла из жидкой фазы, но и получить качественные представления о структуре переходного слоя в жидкости при временах $\sim 10^{-11} \text{ s}$.

Список литературы

- [1] *Экштайн В.* Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. М.: Мир, 1995.
- [2] *Ostermeyer G.-P., Понов В.Л.* // Письма в ЖТФ. 2000. Т. 26. В. 6. С. 59–66.
- [3] *Полухин В.А., Ухов В.Ф., Дзугутов М.М.* Компьютерное моделирование динамики и структуры жидких металлов. М.: Наука, 1981.
- [4] *Ilegems M., Panish M.B., Arthur J.R.* // J. Chem. Thermodynamics. 1974. V. 6. P. 157–177.
- [5] *Panish M.B.* // J. Crystal. Growth. 1974. V. 27. P. 6–20.
- [6] *Thurmond C.D.* // J. Phys. Chem. Solids. 1965. V. 26. N 5. P. 785–802.