

РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ В МОНОКРИСТАЛЛАХ GaAs, ВЫРАЩИВАЕМЫХ В ТОНКОМ СЛОЕ РАСПЛАВА МЕТОДОМ КИРОПУЛОСА С ЖИДКОСТНОЙ ГЕРМЕТИЗАЦИЕЙ

Г. П. Ковтун, А. И. Кравченко, А. И. Жуков, А. Н. Стерлев,
А. П. Щербань

Харьковский физико-технический институт Академии наук Украины, 310108, Харьков, Украина

(Получена 30 ноября 1992 г. Принята к печати 26 января 1993 г.)

Приведены результаты выполненных с применением компьютерного моделирования расчетов температурных полей в монокристаллах GaAs, выращиваемых в тонком слое расплава методом Киропулоса с жидкостной герметизацией (ТС-ЖГК). Показано, что с применением донного, бокового и погруженного во флюс дополнительного нагревателя ТС-ЖГК методом может быть выполнена кристаллизация слоя GaAs толщиной 0.5—1.0 мм в тигле большого (80—130 мм) диаметра в температурных полях с низкими значениями вертикальной (6—18 К/см) и радиальной (2—29 К/см) составляющих градиента температуры.

Введение. При разработке новых технологий выращивания монокристаллов полупроводящего GaAs, необходимых для изготовления подложек интегральных схем, предполагается получение материала с высокими электрофизическими параметрами в сочетании с высоким структурным совершенством и большим диаметром монокристалла. Перспективный материал должен иметь [1—2]:

- удельное электросопротивление $\sim 10^8$ Ом · см;
- подвижность основных носителей заряда ≥ 5000 см²/В · с;
- плотность дислокаций $\sim 10^2$ — 10^{-3} см⁻²;
- диаметр ≥ 76 мм.

Первые два из этих требований выполняются при низком и сбалансированном содержании в GaAs донорных и акцепторных примесей, что достигается при использовании чистых исходных компонентов и флюса из V₂O₃, герметизирующего расплав и предотвращающего загрязнение его материалом тигля. Для достижения высокого структурного совершенства монокристаллов требуется разработка технологических приемов, обеспечивающих сохранение стехиометрии и создающих небольшие температурные градиенты в процессе выращивания монокристалла; это делает актуальными моделирование и исследование температурных полей в выращиваемых монокристаллах.

Промышленная технология изготовления подложек интегральных схем включает в себя выращивание объемных монокристаллов методом Чохральского с жидкостной герметизацией (ЖГЧ метод), который обеспечивает получение монокристаллов GaAs с плотностью дислокаций $\sim 10^4$ см⁻² при диаметре 76 мм [1, 2]. В ряде работ, выполненных с применением метода математического моделирования, приводятся результаты исследования температурных полей в монокристаллах GaAs, выращенных ЖГЧ методом: осевая ($\partial T/\partial z$) и радиальная ($\partial T/\partial r$) компоненты градиента температуры в твердой фазе вблизи фронта кристаллизации имеют значения 50—200 К/см и около 10 К/см соответственно

в зависимости от диаметра и длины выращиваемого монокристалла, а также условий роста [3-6].

С целью получения монокристаллов GaAs с меньшей плотностью дислокаций изучаются возможности других методов, в том числе метода Киропулоса с жидкостной герметизацией (ЖГК метод). В работе [3] приводятся данные расчета температурных полей в монокристалле, выращиваемом этим методом, в частности, при высоте монокристалла 20—30 мм $\partial T/\partial z = 23$ К/см в монокристалле диаметром 50 мм и $\partial T/\partial z = 14—30$ К/см в монокристалле диаметром 100 мм (меньшее значение соответствует величине температурного градиента на оси кристалла, большее — на боковой поверхности) при $\partial T/\partial r = 2—3$ К/см. Имеется сообщение о выращивании ЖГК методом монокристаллов GaAs диаметром около 90 мм с плотностью дислокаций $\sim 10^3$ см⁻² [7].

Как в расчетных, так и в экспериментальных работах, посвященных ЖГЧ и ЖГК методам, отмечается, что увеличение диаметра объемного монокристалла ведет к увеличению плотности дислокаций в нем [1-3, 5-9].

Цель работы. В связи с вышеизложенным представляет интерес исследование температурных полей в монокристаллах GaAs, выращиваемых ЖГК методом в разновидности, в которой осуществляется кристаллизация тонкого слоя расплава в плоском тигле большого диаметра. Эта разновидность метода Киропулоса (ТС-ЖГК метод) рассматривается как возможная альтернатива методам выращивания объемных монокристаллов. Монокристалл, выращиваемый ТС-ЖГК методом, может иметь толщину, характерную для пластин, необходимых для изготовления подложек интегральных схем ($\approx 0.5—1$ мм). Кроме того, можно ожидать, что тепловые условия кристаллизации тонкого слоя будут благоприятны для формирования структуры монокристалла с малой плотностью дислокаций, а обработка монокристалла будет упрощена по сравнению с обработкой объемного монокристалла.

Выполнение расчетов. Распределение температуры в растущем кристалле, флюсе и фоновом нагревателе как для ЖГЧ, так и для ЖГК метода представляет собой решение стационарного уравнения теплопроводности

$$\operatorname{div} [k(r, T) \operatorname{grad} T(r)] + \rho(r, T) c_p(r, T) v(r, T) \operatorname{grad} T(r) = Q(r). \quad (1)$$

Здесь $k(r, T)$ — коэффициент теплопроводности, $\rho(r, T)$ — плотность, $c_p(r, T)$ — теплоемкость, $v(r, T)$ — скорость элемента объема, равная скорости вытягивания v_p для кристалла и нулю для расплава и флюса для ЖГЧ метода, тождественно равная нулю для ЖГК метода, $Q(r)$ — удельная мощность объемных источников тепла, отличная от нуля только внутри погруженного во флюс дополнительного нагревателя. Изотерма $T(r) = T_M$, где $T_M = 1511$ К — температура плавления (кристаллизации), определяет границу раздела кристалл—расплав. Для изучения тепловых потоков и температурных полей хорошо приближением является допущение об осесимметричном решении. В качестве граничных условий зададим потоки тепла через внутреннюю поверхность тигля в расплав и флюс, излучение тепла — через поверхность кристалла S_c и флюса S_f :

$$k_{c,m} \operatorname{grad} T(z=0, r) = q_0(r), \quad (2)$$

$$k_{c,m} \operatorname{grad} T(0 < z < z_f, r = r_0) = q_1(z), \quad (3)$$

$$k_f \operatorname{grad} T(z > z_f, r = r_0) = q_1(z), \quad (4)$$

$$\{k_c \operatorname{grad} T(z, r) + \varepsilon_c \sigma (T^4 - T_0^4)\}_{S_c} = 0, \quad (5)$$

$$\{k_f \operatorname{grad} T(z, r) + \varepsilon_f \sigma (T^4 - T_0^4)\}_{S_f} = 0, \quad (6)$$

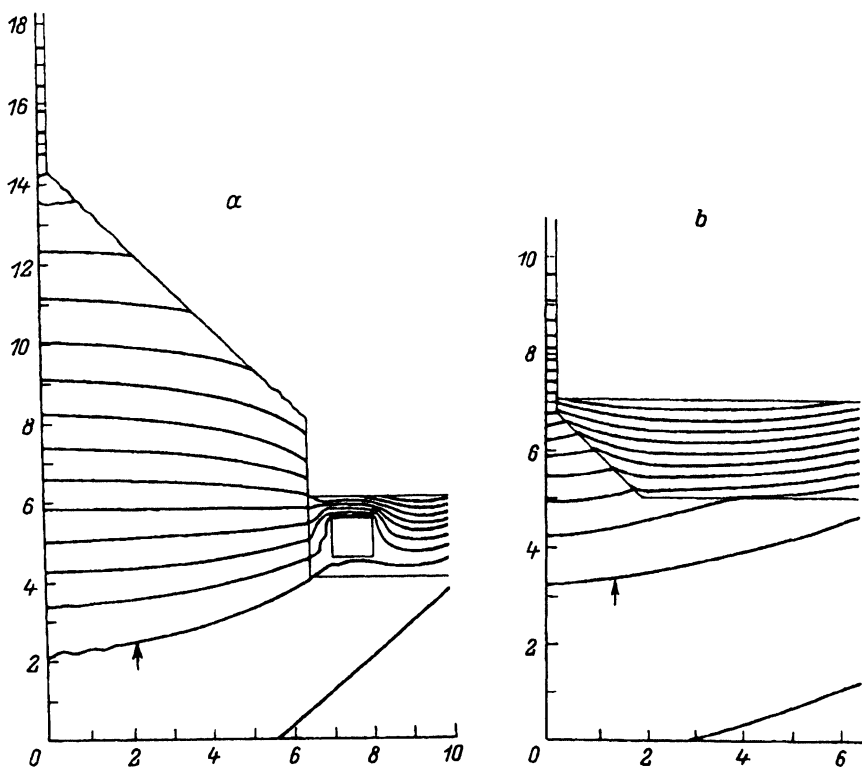


Рис. 1. Температурные поля в монокристаллах GaAs, выращиваемых *a* — ЖГЧ методом; *b* — ЖГК методом. *a*: $q_0 = 1.8 \text{ Вт/см}^2$, $q_1 = 1.5 \text{ Вт/см}^2$, $Q = 20 \text{ Вт/см}^3$, $\partial T/\partial z = 25\text{--}80 \text{ К/см}$, $\partial T/\partial r = 0\text{--}34 \text{ К/см}$. *b*: $q_0 = 2.2 \text{ Вт/см}^2$, $q_1 = 1.0 \text{ Вт/см}^2$, $\partial T/\partial z = 21\text{--}47 \text{ К/см}$, $\partial T/\partial r = 0\text{--}20 \text{ К/см}$. Единицы по осям соответствуют расстоянию (в см).

где k_c, m, f, h — коэффициент теплопроводности кристалла, расплава, флюса и дополнительного нагревателя, q_0 — поток тепла через дно тигля от донного нагревателя, q_1 — поток тепла в расплав (или кристалл) и во флюс от бокового нагревателя, T_0 — эффективная температура окружения, ϵ_c, f — излучательные способности кристалла и флюса, σ — постоянная Стефана—Больцмана. Кроме того, на оси выполняется условие $\partial T/\partial r|_{r=0} = 0$.

Для решения уравнения (1) с граничными условиями (2)—(6) использовалась программа GALEZ [10], в которой реализуется метод конечных элементов. На рис. 1 показано применение программы GALEZ для расчета температурных полей в монокристаллах GaAs, выращиваемых ЖГЧ и ЖГК методами. Изотермы проведены с интервалом в 50 К. Изотерма $T = T_m$, соответствующая температуре плавления GaAs, отмечена стрелкой. На рисунках указаны значения температурных градиентов в монокристалле вблизи фронта кристаллизации. Единица длины на осях рисунков равна 1 см.

При расчетах температурных полей в кристаллах, выращиваемых ТС-ЖГК методом, применялась неравномерная сетка конечных элементов, сгущающаяся ко дну тигля так, чтобы число узлов по вертикали в расплаве и кристалле было не меньше 5.

Для входных в расчеты параметров использовались следующие значения [4, 5]:

$$k_c = 0.07 \text{ Вт/см} \cdot \text{К}, k_m = 0.21 \text{ Вт/см} \cdot \text{К},$$

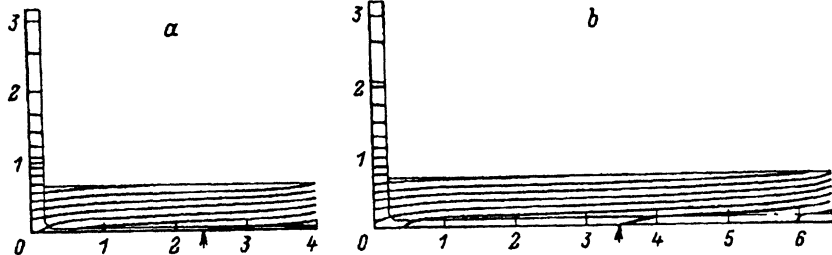


Рис. 2. Температурные поля в монокристаллах GaAs, выращиваемых ТС—ЖГК методом; *a* — при толщине слоя расплава 0.5 мм в тигле диаметром 80 мм; $q_0 = 8.4$ Вт/см², $q_1 = 1.8$ Вт/см², $\partial T/\partial z = -87$ К/см, $\partial T/\partial r = 21$ К/см. *b* при толщине слоя расплава 1.0 мм в тигле диаметром 130 мм; $q_0 = 8.4$ Вт/см², $q_1 = 3.3$ Вт/см², $\partial T/\partial z = 110$ К/см, $\partial T/\partial r = 12$ К/см. Единицы по осям соответствуют расстоянию (в см).

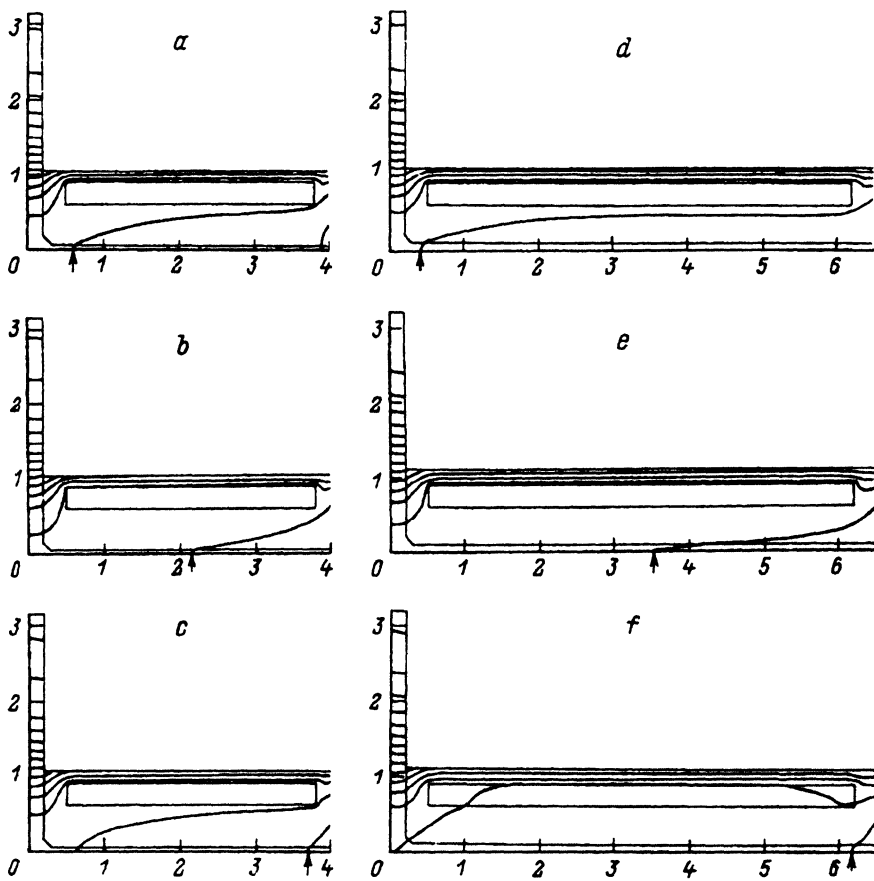


Рис. 3. Температурные поля в монокристаллах GaAs, выращиваемых ТС—ЖГК методом с применением погруженного во флюс дополнительного нагревателя; *a*—*c* — при толщине слоя расплава 0.5 мм в тигле диаметром 80 мм; *d*—*f* — при толщине слоя расплава 1.0 мм в тигле диаметром 130 мм. *a*: $q_0 = 0.7$ Вт/см², $q_1 = 2.4$ Вт/см², $Q = 47$ Вт/см³, $\partial T/\partial z = 18$ К/см, $\partial T/\partial r = 29$ К/см. *b*: $q_0 = 0.7$ Вт/см², $q_1 = 2.4$ Вт/см², $Q = 45$ Вт/см³, $\partial T/\partial z = 7$ К/см, $\partial T/\partial r = 9$ К/см. *c*: $q_0 = 0.7$ Вт/см², $q_1 = 2.2$ Вт/см², $Q = 42$ Вт/см³, $\partial T/\partial z = 8$ К/см, $\partial T/\partial r = 29$ К/см. *d*: $q_0 = 0.8$ Вт/см², $q_1 = 2.6$ Вт/см², $Q = 43$ Вт/см³, $\partial T/\partial z = 14$ К/см, $\partial T/\partial r = 23$ К/см. *e*: $q_0 = 0.7$ Вт/см², $q_1 = 2.3$ Вт/см², $Q = 42$ Вт/см³, $\partial T/\partial z = 6$ К/см, $\partial T/\partial r = 2$ К/см. *f*: $q_0 = 0.7$ Вт/см², $q_1 = 2.2$ Вт/см², $Q = 40$ Вт/см³, $\partial T/\partial z = 11$ К/см, $\partial T/\partial r = 29$ К/см. Единицы по осям соответствуют расстоянию в см.

$$k_f = 0.018 \text{ Вт/см} \cdot \text{К}, k_b = 0.4 \text{ Вт/см} \cdot \text{К}, T_M = 1511 \text{ К},$$

$$T_0 = 500 \text{ К}, \varepsilon_c = 0.5, \varepsilon_f = 0.75.$$

Результаты. Результаты расчета температурных полей в монокристаллах GaAs, выращиваемых ТС-ЖГК методом, показаны на рис. 2, 3.

При понижении величины тепловых потоков q_0 , q_1 и удельной мощности тепловыделения Q фронт кристаллизации (изотерма 1511 К) перемещается от затравочного монокристалла к стенке тигля.

В случае, когда дополнительный нагреватель отсутствует (рис. 2), кристаллизация происходит при низких значениях $\partial T/\partial r = 12\text{--}37 \text{ К/см}$, но при относительно большой величине $\partial T/\partial z = 77\text{--}110 \text{ К/см}$.

Результат применения погруженного во флюс дополнительного нагревателя показан на рис. 3. При выбранных значениях q_0 , q_1 и Q вертикальная составляющая температурного градиента уменьшается до величины $\partial T/\partial z = 6\text{--}18 \text{ К/см}$ при низком значении $\partial T/\partial r = 2\text{--}29 \text{ К/см}$.

Можно отметить, что температурный градиент на фронте кристаллизации имеет меньшие значения в области слоя GaAs, удаленной от затравочного монокристалла на расстояние около $R/2$ (R — радиус тигля).

Выводы. Приведенные расчеты показывают, что ТС-ЖГК методом с применением донного, бокового и погруженного во флюс дополнительного нагревателя можно осуществить кристаллизацию слоя GaAs толщиной 0.5—1 мм в тигле большого (80—130 мм) диаметра в температурных полях с низкими значениями вертикальной (6—18 К/см) и радиальной (2—29 К/см) составляющих градиента температуры.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] С. И. Файфер, Б. Г. Захаров, В. Б. Семенова. Электрон. техн. Материалы, 2 (231), 3 (1988).
- [2] Р. Н. Томас, Ш. Макгайсен, Г. У. Эдридж, Д. Л. Баррет. ТИИЭР, 76, 48 (1988).
- [3] M. Duseaux. J. Cryst. Growth, 61, 576 (1983).
- [4] A. B. Crowley, E. J. Stern, D. T. J. Hurlle. J. Cryst. Growth, 97, 697 (1989).
- [5] G. O. Meduoye, D. J. Bacon, K. E. Evans. J. Cryst. Growth, 108, 627 (1991).
- [6] P. Nicodeme. F. Dupret, M. J. Crochet. In: Proc. V Int. Conf. on Semi-Insulating III—V Mater. Malmo, 1988. Inst. Phys. Conf. Ser. 92 (ed. by G. Grossmann, L. Ledebro), 465. London—Bristol (1988).
- [7] G. Jacob. J. Cryst. Growth, 58, 455 (1982).
- [8] М. Г. Мильвидский. Полупроводниковые материалы в современной электронике. М. (1986).
- [9] М. Г. Мильвидский, В. Б. Освенский. Структурные дефекты в монокристаллах полупроводников. М. (1984).
- [10] А. И. Жуков. Препринт ХФТИ 92-17. Харьков (1992).

Редактор В. В. Чалдышев