

02;03;12

©1994 г.

ДИАГРАММА НАПРАВЛЕННОСТИ ЭФФУЗИОННОЙ ЯЧЕЙКИ С СОПЛОМ РАЗЛИЧНОЙ КОНФИГУРАЦИИ

Е.В.Озолова, И.В.Игнатъев, А.П.Абрамов

Научно-исследовательский институт физики Санкт-Петербургского университета, 198904
Оптический институт, 199034, Санкт-Петербург

В приближении свободного молекулярного течения газа выполнен расчет диаграммы направленности молекулярного потока, формируемого эффузионной ячейкой с соплом цилиндрической и конической форм. Исследована зависимость диаграммы направленности от отношения высоты сопла к радиусу основания и от угла раствора сопла. Теоретически исследована эффективность эффузионной ячейки с соплом различной конфигурации в установках молекулярной лучевой эпитаксии. Проанализирована однородность распределения молекулярного потока в пределах подложки. Показано, что максимальная однородность распределения потока и эффективность работы достигается для эффузионной ячейки с коническим соплом, согласованным по апертуре с угловыми размерами подложки.

Введение

В настоящее время для выращивания эпитаксиальных структур методом молекулярной лучевой эпитаксии (МЛЭ) используются эффузионные ячейки различной конструкции, которые формируют молекулярные пучки, отличающиеся степенью однородности распределения потока в пределах выращиваемой гетероструктуры и эффективностью использования молекулярного пучка. Эти характеристики, определенные диаграммой направленности молекулярного источника, важны для выращивания совершенных структур с заданным составом и высокой однородностью свойств в пределах подложки. В ряде работ [1-6] в различных приближениях решено уравнение Клаузинга для свободно-го молекулярного течения газа и рассчитаны диаграммы направленности источников с цилиндрическим каналом. В этих же работах приведены отдельные экспериментальные результаты, которые качественно подтверждают результаты расчетов. В работах [7-10] рассмотрен молекулярный источник конической формы и исследована однородность распределения формируемого им потока на подложке. Авторы этих

работ пришли к выводу о целесообразности использования в установках МЛЭ эффузионных источников с коническим соплом. Однако диаграмма направленности источника с коническим соплом до настоящего времени не изучена.

В настоящей работе в рамках описанной ниже модели выполнен расчет диаграммы направленности молекулярного потока, сформированного источником с цилиндрическим и коническим соплами при различных отношениях высоты сопла к радиусу основания и различных углах раствора, а также исследованы однородность молекулярного пучка и эффективность источников различной конфигурации. Полученные результаты качественно согласуются с экспериментальными [5,6].

Модель источника с коническим соплом

При расчете диаграммы направленности используются следующие приближения.

1. Будем считать входное отверстие сопла источником частиц с известной концентрацией и назовем его дном. Концентрация рассчитывается по формуле

$$N_b = \frac{P}{kT},$$

где P — давление насыщенных паров используемого вещества при заданной температуре T , которое может быть найдено из справочника [11]; k — постоянная Больцмана.

Так как площадь отверстия сопла обычно мала по сравнению с площадью внутренней поверхности тигля, то в нем устанавливается равновесная концентрация частиц, соответствующая заданной температуре.

2. Длина свободного пробега частицы в потоке вещества рабочей плотности, используемого для выращивания структур методом МЛЭ, больше характерных размеров сопла, поэтому реализуется режим молекулярного течения и столкновением между частицами можно пренебречь.

3. После соударения частиц со стенкой сопла происходит полностью диффузное рассеяние без зеркальной составляющей.

4. Конструкция сопла такова, что температура газа и температура стенок сопла одинаковы, следовательно, средняя равновесная скорость молекул не меняется в результате соударений со стенкой.

В связи с тем что цилиндрическое сопло является частным случаем конического, вывод основных формул приводится для конического сопла. Сопло рассматривается как усеченный конус высотой h , с радиусом верхнего основания R и с радиусом нижнего основания r . Угол раствора конуса равен 2χ , где χ определяется по формуле $\chi = \arctg((R - r)/h)$.

Для расчета диаграммы направленности мы вычислим угловую плотность потока $n(\theta_1) = dN(\theta_1)/d\theta_1$, где $N(\theta_1)$ — поток частиц из сопла в заданном направлении. Он формируется прямым потоком частиц со дна сопла $n_s(\theta_1)$ и потоком частиц, диффузно рассеянных стенкой сопла $n_d(\theta_1)$,

$$n(\theta_1) = n_s(\theta_1) + n_d(\theta_1).$$

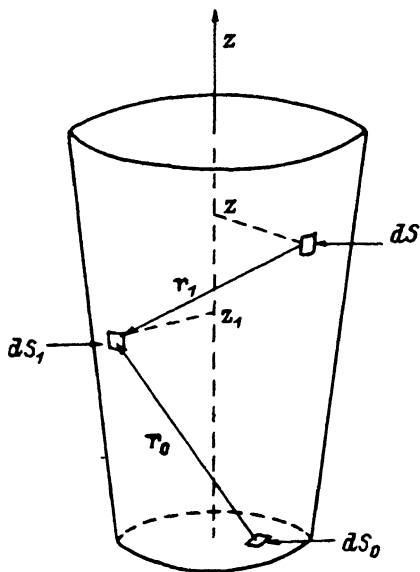


Рис. 1. К расчету плотности потока частиц на элемент dS_1 стенки сопла с элемента дна сопла dS_0 и произвольного элемента стенки сопла dS . Радиус-векторы r_0 и r_1 указывают направление потоков.

Плотность прямого потока частиц $n_s(\theta_1)$ в направлении θ_1 с части дна сопла, видимой через верхнее основание конуса, рассчитывается по формуле

$$n_s(\theta_1) = \frac{1}{4\pi} N_b v S \cos \theta_1, \quad (1)$$

где N_b — концентрация частиц, v — скорость частиц данного сорта.

При углах $\theta_1 < \chi$ дно сопла видно полностью, а при $\chi < \theta_1 \leq \theta_2$ лишь часть дна с площадью

$$S = \frac{1}{2} \left(R^2(\alpha - \sin \alpha) + r^2(\beta - \sin \beta) \right),$$

где $\alpha = 2 \arccos((l^2 + R^2 - r^2)/2lR)$, $\beta = 2 \arccos((l^2 - R^2 + r^2)/2lr)$, $l = h \operatorname{tg} \theta_1$. Здесь θ_2 — максимальный угол пролета частиц без рассеяния, $\theta_2 = \operatorname{arctg}((R+r)/h)$.

Для расчета потока частиц со стенок сопла на подложку необходимо знать распределение плотности потока частиц $n_0(z)$ на стенку сопла вдоль его вертикальной оси z . Рассмотрим площадку dS_1 , расположенную так, как показано на рис. 1. Плотность потока $n_0(z_1)$ определяется суммой плотности потока частиц, попадающих на рассматриваемый элемент стенки со дна сопла $n_f(z_1)$, и плотности потока частиц, рассеянных всей стенкой сопла на рассматриваемую площадку $n_w(z_1)$,

$$n_0(z_1) = n_f(z_1) + n_w(z_1). \quad (2)$$

Используя хорошо известную формулу для расчета количества молекул, попадающих за 1 с со дна на площадку стенки S в телесном угле $d\Omega$

$$dN = \frac{1}{4\pi} N_b v S \cos \alpha d\Omega$$

(α — угол между нормалью к рассматриваемой площадке и направлением движения), получим выражение для потока молекул, движущихся с элемента дна dS_0 на рассматриваемый элемент поверхности сопла dS_1 ,

$$dn_f = \frac{N_b v}{4\pi} (\sin^2 \theta \cos \varphi \cos \chi - \cos \theta \sin \theta \sin \chi) d\theta d\varphi, \quad (3)$$

где углы θ и φ определяют направление радиус-вектора r_0 , показанного на рис. 1.

Так как произведение $N_b v$ не влияет на угловое распределение и присутствует во всех выражениях для плотностей потоков, мы его опустим и будем считать плотности потоков в единицах $N_b v$.

Полная плотность потока частиц, двигающихся со дна на элемент стенки сопла, получается простым интегрированием (3)

$$n_f(z_1) = \frac{\cos \chi}{4\pi} \int_0^{\theta_m} (2 \sin^2 \theta \sin \varphi_m - \varphi_m \sin 2\theta \operatorname{tg} \chi) d\theta, \quad (4)$$

где φ_m и θ_m — максимально возможные углы, под которыми частицы попадают со дна на элемент стенки сопла.

Они определяются выражениями

$$\varphi_m = \arccos\left(\frac{(k_1^2 + m_1^2 - r^2)}{(2m_1 k_1)}\right); \quad \text{где } k_1 = z_1 \operatorname{tg} \chi;$$

$$m_1 = r + z_1 \operatorname{tg} \chi \quad \text{и} \quad \theta_m = \operatorname{arctg}\left(\frac{(2r + z_1 \operatorname{tg} \chi)}{z_1}\right).$$

Количество молекул, приходящих на единичную площадку стенки dS_1 с произвольного элемента стенки сопла dS , вычисляется аналогичным образом. Полная плотность потока частиц, рассеянных стенкой на элемент стенки dS_1 , выражается формулой

$$n_w(z_1) = \frac{\cos \chi}{2\pi} \int_0^h \frac{n_0(z)}{m_1} I(z, z_1) dz, \quad (5)$$

где $n_0(z)$ — плотность потока частиц с боковой площадки dS ,

$$I(z, z_1) = \frac{1}{\pi R} \left\{ \varphi_p - a\beta_m - \frac{1}{2} (1 - a^2) a \left(\beta_m + \frac{1}{2} \sin 2\beta_m \right) \right\} \quad (5a)$$

Выражение (5a) получено интегрированием по азимутальному углу φ . Здесь $a^2 = x(2+x)$, $x = ((z - z_1)^2 / m m_1 + m / m_1 + m_1 / m) / 2 - 1$, $m = r + z \operatorname{tg} \chi$, $\beta_m = \operatorname{arctg}(a \operatorname{tg} \varphi_p)$, $\varphi_p = (\pi - \varepsilon) / 2$, где малая величина $\varepsilon \cong 0.1^\circ$ необходима для того, чтобы исключить вклад частиц, рассеянных самой площадкой.

Таким образом, учитывая формулу (2), получаем следующее выражение для плотности потока на элемент стенки сопла:

$$n_0(z_1) = n_f(z_1) + \frac{\cos \chi}{2\pi} \int_0^h n_0(z)(m_1)^{-1} I(z, z_1) dz. \quad (6)$$

Поскольку искомая функция $n_0(z_1)$ входит в интеграл второго слагаемого, то выражение (6) представляет собой интегральное уравнение Фредгольма второго рода. Похожее выражение для частного случая цилиндрического сопла получено Клаузингом [1]. Расчеты показали, что вклад потока частиц, рассеянных стенкой, немал, поэтому воспользоваться теорией возмущения для решения этой задачи нельзя. Для численного решения уравнения мы использовали следующую процедуру: значения функции $n_0(z_1)$ рассматривались в наборе дискретных, равноотстоящих по оси z точек (в нашем случае набор состоял из 80 точек). Тогда уравнение сводилось к системе алгебраических уравнений, для решения которого мы использовали метод исключения Гаусса.

Зная $n_0(z_1)$, можно рассчитать плотность потока частиц со стенки сопла $n_d(\theta_1)$ в заданном направлении θ_1 . Для случая $\theta_1 < \chi$

$$n_d(\theta_1) = 2 \cos \theta_1 \operatorname{tg} \chi \int_0^h n_0(z_1) m_1 dz_1. \quad (7)$$

Если же $\theta_1 > \chi$, то

$$n_d(\theta_1) = \frac{2}{\pi} \int_{z_m}^h n_0(z_1) m_1 (\sin \theta_1 \sin \varphi_{1m} + \cos \theta_1 \operatorname{tg} \chi \varphi_{1m}) dz_1, \quad (8)$$

где $\varphi_{1m} = \arccos((m_1^2 + l_1^2 - R^2)/(2l_1 m_1))$, $l_1 = (h - z_1) \operatorname{tg} \theta_1$.

При $\theta_1 < \theta_2$ интегрирование проводится по всей стенке сопла ($z_m = 0$), а при больших углах θ_1 нижний предел интегрирования определяется величиной $z_m = (l - R - r)/(\operatorname{tg} \theta_1 + \operatorname{tg} \chi)$.

Выражения для расчета диаграммы направленности сопла цилиндрической конфигурации являются частным случаем приведенных выше формул для конического сопла при $\chi = 0$ ($R = r$).

Для подтверждения правильности полученных выражений были проведены проверочные расчеты. В качестве критерия служили следующие очевидные утверждения, основанные на законе сохранения числа частиц: 1) полный поток частиц, влетающих в сопло через дно, равен суммарному потоку частиц, вылетающих из сопла и возвращающихся обратно в тигель; 2) сумма прямого потока частиц через сопло и потока частиц со дна сопла на стенки должна быть равна потоку частиц, влетающих в сопло из тигля $N_b \pi R^2/4$.

Кроме того, правильность решения уравнения (6) проверена путем подстановки найденного решения $n_0(z_1)$ в уравнение и повторного вычисления $n_0(z_1)$ непосредственным интегрированием.

С помощью программы, составленной на основании приведенных выше формул, выполнен расчет диаграммы направленности источника с соплом различной конфигурации и разным соотношением h/r .

Диаграммы направленности для эффузионного источника с цилиндрическим соплом представлены на рис. 2. При малой величине h/r (кривая 1) сопло можно рассматривать как отверстие, тогда распределение плотности потока частиц описывается косинусом. При большом отношении h/r (кривые 2-4) в диаграмме направленности наблюдается острый пик вблизи осевого направления сопла (при малых углах θ_1), что приводит к неоднородному распределению плотности потока частиц по поверхности подложки. По мере увеличения соотношения h/r диаграмма направленности постепенно сужается. Для кривой 4 приведены вклады потоков частиц со дна и стенки сопла (штриховые линии). Ясно видно, что острая вершина диаграммы образуется за счет прямого потока частиц со дна сопла. При увеличении высоты плотность потока частиц падает, но острый пик остается.

Длинное боковое крыло диаграммы направленности при больших углах θ_1 образуется частицами, диффузно рассеянными стенкой сопла. Это крыло приводит к бесполезному расходу рабочего материала молекулярного источника и снижает его эффективность. Избавиться от него не удастся даже при увеличении соотношения h/r , так как уменьшение крыла происходит медленно (кривая 4).

Иная ситуация характерна для источника с коническим соплом, диаграмма направленности которого имеет четко выраженную "полочку" (рис. 3, а), позволяющую получить однородное распределение частиц по поверхности подложки. Из рисунка видно, что в отличие от цилиндрического сопла в формировании молекулярного пучка в осевом направлении принимают участие оба потока (со дна и стенок сопла). Это приводит к увеличению плотности потока частиц в пределах полочки при увеличении высоты сопла.

В диаграмме направленности конического сопла, так же как и для цилиндрического сопла, имеется длинное крыло, которое сравнительно-

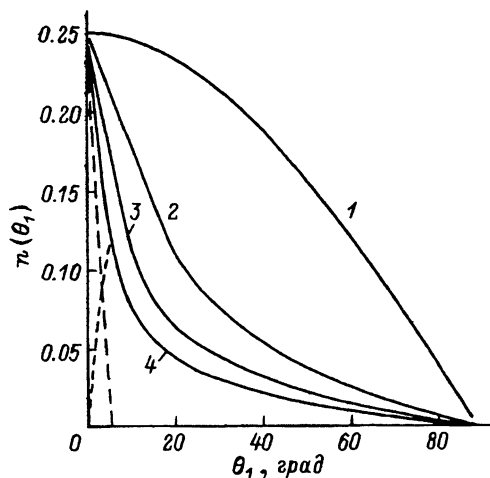


Рис. 2. Диаграмма направленности ($n(\theta_1)$) источника с цилиндрическим соплом для разных соотношений h/r ($n(\theta_1)$ выражается в единицах $N_b v$).
1 — $h/r = 0.01$, 2 — 5, 3 — 10, 4 — 20.
Штриховая линия — вклады потоков со дна сопла, пунктир — со стенки сопла.

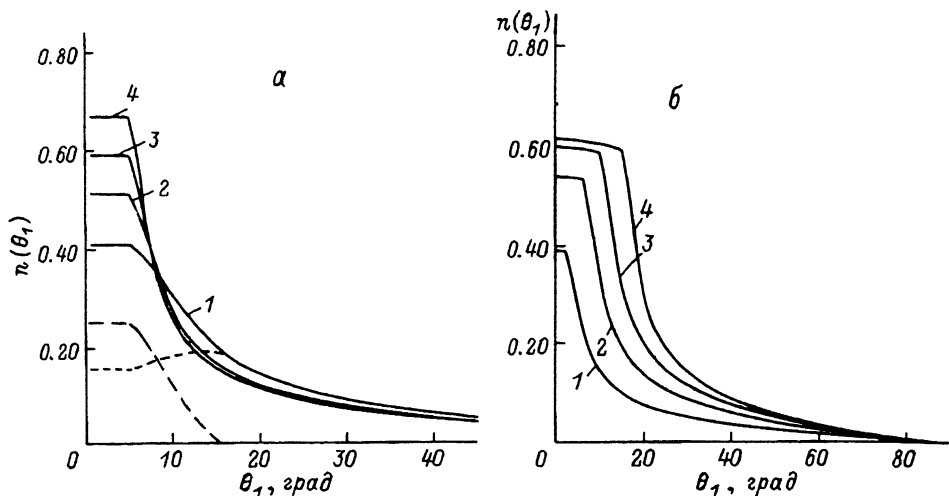


Рис. 3. Диаграмма направленности $n(\theta_1)$ источника с коническим соплом при фиксированном угле раствора сопла $\chi = 5^\circ$ для разных соотношений h/r (а) и при постоянном соотношении $h/r = 20$ для различных углов раствора сопла χ (б). а — h/r : 1 — 10, 2 — 20, 3 — 30, 4 — 40; б — χ , град: 1 — 2, 2 — 6, 3 — 10, 4 — 15. Штриховая линия и пунктир — то же, что и на рис. 2.

но мало уменьшается при увеличении соотношения h/r . Таким образом, в данном случае крыло также достаточно велико и продолжает играть существенную отрицательную роль.

Уменьшить крыло можно путем понижения вклада потока частиц со стенки сопла, которое достигается путем увеличения угла раствора сопла при фиксированном соотношении остальных параметров. Диаграмма направленности для такой ситуации показана из рис. 3,б. Видно, что при увеличении χ существенно увеличиваются плотность осевого потока частиц и угловой размер "полочки".

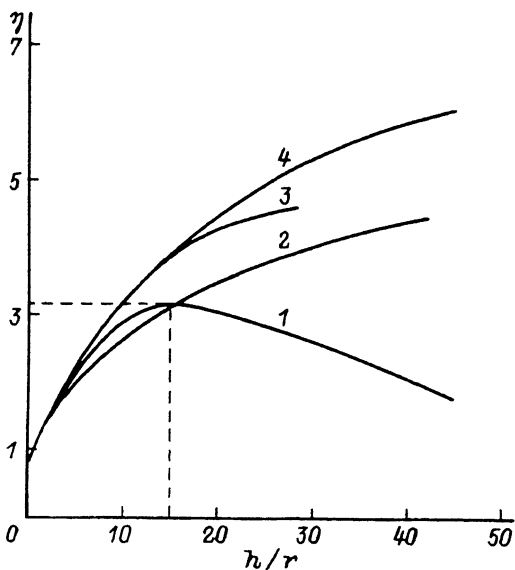


Рис. 4. Зависимость коэффициента эффективности работы сопла от соотношения параметров.

1 — источник с цилиндрическим соплом, 2 — конический с различным углом раствора: 2 — $\chi = 10$, 3 — 3, 4 — 5° .

Важной характеристикой сопла является его эффективность, которую мы определим как долю молекулярного потока, попадающего на поверхность подложки. Она зависит от диаграммы направленности и от углового размера подложки $2\chi_s$, т.е. угла, под которым видна подложка из точки расположения сопла. При этом мы считаем размеры сопла малыми по сравнению с расстоянием до подложки, что выполняется для установок МЛЭ. Для расчета эффективности был выбран угол $\chi_s = 5^\circ$, характерный для установок МЛЭ.

На рис. 4 показана зависимость эффективности источников с различной конфигурацией сопла от соотношения h/r . Следует обратить внимание на то, что эффективность мала и составляет единицы процентов. Для конического сопла она возрастает с увеличением соотношения h/r и превосходит эффективность источника с цилиндрическим соплом, достигающего максимального значения, равного 3.15%, при $h/r = 15$. Наиболее эффективным является коническое сопло с углом раствора $\chi = \chi_s$ (кривая 4 на рис. 4).

Следует подчеркнуть, что, несмотря на невысокую эффективность рассмотренных источников, она значительно выше эффективности косинусного источника (0.75% при данном χ_s), которому соответствует полностью заполненная рабочим веществом эффузионная ячейка без сопла или источник с тонкой диафрагмой.

Таким образом, выполненные расчеты показывают, что коническое сопло имеет важные преимущества перед соплом цилиндрической формы по однородности распределения потока частиц на подложку и эффективности. Эффективность работы конического сопла возрастает с увеличением его длины, однако это возрастание сублинейно, поэтому оптимальная длина сопла должна выбираться из конструктивных соображений.

Список литературы

- [1] Knudsen M. // Ann. der Phys. 1909. Vol. 28. P. 999.
- [2] Herman Marian A. // Vacuum. 1982. Vol. 32. N 9. P. 555-565.
- [3] Giordmaine J.A., Wangt T.C. // J. Appl. Phys. 1960. Vol. 31. N 3. P. 463-471.
- [4] Неудачин И.Г., Породнов В.Т., Суетин П.Е. // ЖТФ. 1972. Т. 42. Вып. 5. С. 1069-1072.
- [5] Chen L.Y.L. // J. Vac. Sci. Technol. 1978. Vol. 15. P. 10-12.
- [6] Наумов А.И. // ЖТФ. 1963. Т. 33. Вып. 1. С. 127-131.
- [7] Wasilewski Z.R., Aers G.C. // J. Vac. Sci. Technol. 1991. B. Vol. 9. N 1. P. 120.
- [8] Wasilewski Z.R., Aers G.C. // J. Vac. Sci. Technol. 1992. B. Vol. 10. N 2. P. 815-818.
- [9] Spring Thorpe A.J., Majeed A., Miner C.J. // J. Vac. Sci. Technol. 1991. A. Vol. 9. N 6. P. 3175-3177.
- [10] Wasilewski Z.R., Aers G.C. // J. Crystal Growth. 1991. Vol. 11. P. 70-74.
- [11] Технология тонких пленок / Под ред. Л. Майссела. М.: Сов. радио, 1977. Т. 1. С. 24.