

01;06.2;11

©1994

О РАСПРЕДЕЛЕНИИ АТОМОВ ПРИМЕСИ ПРИ δ -ЛЕГИРОВАНИИ В ПРОЦЕССЕ МОЛЕКУЛЯРНО-ЛУЧЕВОЙ ЭПИТАКСИИ

Б.К.Медведев, В.Г.Мокеров, Н.В.Песков

1. В работах, посвященных изучению свойств δ -легированных полупроводниковых слоев, предполагается равномерное распределение примеси по поверхности кристалла. Однако, учитывая специфику процесса δ -легирования (адсорбция примеси происходит на стационарную поверхность, в отличие от легирования в процессе роста кристалла), следует предположить, что распределение примеси будет определяться распределением адсорбционных центров с минимальной свободной энергией. Это обстоятельство особенно важно, когда распределение адсорбционных центров анизотропно. Например, на вицинальной грани (рис. 1) такие адсорбционные центры будут преимущественно располагаться вдоль моноатомных "ступеней". Линейные цепочки адсорбированных на ступенях атомов могут стать основой для формирования одномерного электронного газа ("квантовые нити") или нульмерных систем ("квантовые точки") в случае разрыва этих нитей.

В данном сообщении анализируется распределение адсорбированных атомов примеси на вицинальной грани с помощью простой модели случайного блуждания по одномерной решетке с выделенным узлом и периодическими граничными условиями.

2. Для оценки параметров стационарного распределения мы используем следующую решеточную модель миграции частиц примеси по поверхности кристалла.

Предположим, что поверхность кристалла однородна и атомы в приповерхностном слое расположены так, как показано на рис. 1. Тогда на поверхности можно рассматривать двумерную решетку, узлы которой соответствуют центрам адсорбции атомов примеси. Мы предполагаем, что атомы примеси могут находиться только в этих узлах и перемещаться по поверхности посредством скачков в соседние свободные узлы. При малой поверхностной концентрации можно не учитывать латеральные взаимодействия атомов примеси. Мы будем интересоваться только перемещениями атомов в направлении, перпендикулярном ступеням. Таким образом, мы рассматриваем миграцию атома по одномерной решетке с выделенными узлами, расположенными на

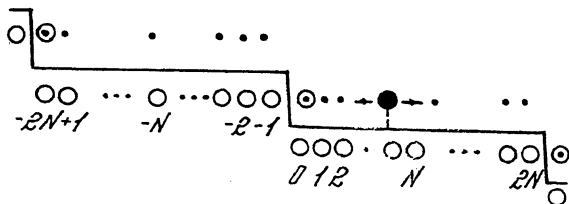


Рис. 1. Поперечный разрез кристалла.

Кружки — атомы в приповерхностном слое, точки — адсорбционные центры.

ступенях. Эту миграцию можно описать с помощью уравнений случайного блуждания по одномерной периодической решетке [1]:

$$\dot{p}_i = kp_{i-1} - 2kp_i + kp_{i+1}, \quad 1 < |i| \leq N;$$

$$\dot{p}_{\pm 1} = kp_{\pm 2} - 2kp_{\pm 1} + k_0p_0,$$

$$\dot{p}_0 = kp_{-1} - 2k_0p_0 + kp_1,$$

$$p_{N+1} = p_{-N}, \quad p_{-(N_1)} = p_N, \quad \sum_{-N}^N p_i = 1, \quad (1)$$

где p_i — вероятность нахождения атома в i -ом узле. Предполагается, что на террасе размещается $2N + 1$ центров адсорбции; узел с номером $i = 0$ расположен на ступени. Средняя частота скачков на террасе равна k , средняя частота скачков из нулевого узла равна k_0 . Предполагается, что атом притягивается к ступени, т.е. $k_0 < k$.

Система (1) имеет стационарное решение

$$p_0 = 1/(1 + 2N\gamma), \quad p_i = \gamma/(1 + 2N\gamma), \quad i \neq 0, \quad (2)$$

где $\gamma = k_0/k$.

Для оценки частоты скачков используем формулу Аррениуса

$$k = R \cdot \exp[-E/k_B T],$$

где E — энергия активации скачка, k_B — постоянная Больцмана, T — температура кристалла. Тогда для γ получаем

$$\gamma = \exp[-E_s/k_B T],$$

где E_s — дополнительная энергия активации скачка в нулевом узле ($E_0 = E + E_s$).

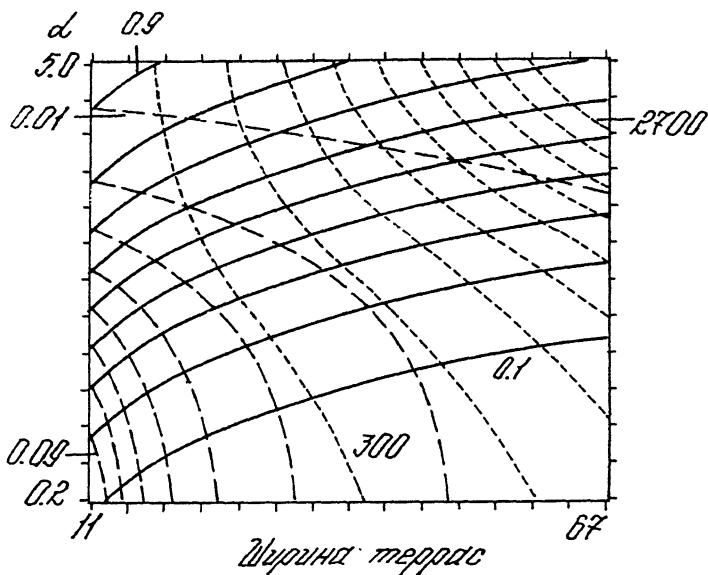


Рис. 2. Линии уровня стационарного распределения атомов примеси.

Сплошные линии — p_0 , штриховые линии — p_i , пунктирные линии — время установления в $[kt]$.

На рис. 2 показаны линии уровня стационарного распределения (2) в зависимости от ширины террасы (N) и параметра $\alpha = E_s/k_B T$. Значения p_0 показаны сплошными линиями, а p_i — штриховыми линиями. Время установления стационарного распределения зависит от α , N и начального положения атома. Это время оценивалось путем численного решения системы (1) с начальными условиями вида $p_i(0) = \delta_{ni}$ до выполнения условия $\max_i |p_i(t) - p_{st,i}| < \varepsilon$, где $p_{st,i}$ — распределение (2). Линии уровня максимального времени установления для $\varepsilon = 10^{-4}$ в безразмерных единицах kt (число скачков) показаны на рис. 2 пунктирными линиями.

3. Из рассмотренной модели следует, что стационарное распределение атомов примеси на ступенчатой грани кристалла неравномерно. Вероятность расположения атома на ступени отличается от вероятности расположения в других узлах. Эти вероятности зависят от двух параметров: N и α . Величина N определяется углом разориентации грани кристалла, величина α определяется химическим составом кристалла и примеси и зависит от температуры кристалла. Следовательно, стационарное распределение примеси

можно контролировать посредством выбора угла разориентации грани и/или температуры.

С помощью рис. 2 можно оценить значения N , T и времени выдержки для получения нужного распределения. Пусть заданы значения $p_{st,0} = p_0$ и $p_{st,i} = p_1$. На рис. 2 находим точку пересечения линий уровня p_0 и p_1 . Абсцисса этой точки даст значение N , а ордината — значение α . По N определяется угол разориентации, а по α и оценке энергии активации E_s определяется температура.

В заключение отметим, что поскольку модель не учитывает неидеальность поверхности и латеральные взаимодействия адатомов вблизи ступени, где их локальная концентрация повышена, а также другие факторы, которые могут влиять на распределение примеси, полученные оценки являются приближенными. Однако рассмотренная модель подтверждает принципиальную возможность управления распределением атомов примеси при δ -легировании.

Список литературы

- [1] Ван Кампен Н.Г. Стохастические процессы в физике и химии. М., 1990. 376 с.

Институт радиотехники и электроники
Москва

Московский государственный
университет им. М.В.Ломоносова

Поступило в Редакцию
5 апреля 1994 г.
