

Моделирование массопереноса в условиях локальной газофазной эпитаксии с использованием маски

© Л.Б. Проэкт, М.А. Калитеевский, В.Б. Кантор, Д.А. Пиотровский, М.А. Сеницын, Б.С. Явич

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 29 мая 1996 г. Принята к печати 16 сентября 1996 г.)

Методом численного моделирования проведено исследование диффузионного массопереноса реагентов в условиях локальной газофазной эпитаксии с использованием маски. Рассмотрено возможное влияние адсорбции реагентов на поверхность маски и их поверхностной диффузии на скорость локального роста. Проведено сравнение результатов расчета с имеющимися в литературе экспериментальными данными.

1. Введение

Эффективным методом получения различных полупроводниковых приборных структур является локальная газофазная эпитаксия (ЛГФЭ) через маску [1–5]. Развитие техники локальной эпитаксии позволяет применять новые подходы при монокристаллической интеграции создаваемых на основе GaAs и InP полупроводниковых приборов. Современный уровень развития этой техники позволил реализовать такие режимы роста, при которых осаждения выращиваемого материала на поверхность маски не происходит [2,3].

Обычно при ГФЭ параметры процесса выбираются таким образом, чтобы скорость роста лимитировалась диффузионным массопереносом одного из компонентов через диффузионный пограничный слой к поверхности подложки. В таких режимах концентрация лимитирующего компонента на поверхности подложки принимается равной нулю, а пограничный слой может рассматриваться как неподвижный (см. Приложение).

Известно, что скорость роста при ЛГФЭ увеличивается по сравнению со скоростью роста на открытой поверхности подложки при обычной эпитаксии, осуществляемой в тех же условиях [5,6]. Считается, что это увеличение обусловлено как увеличением массопереноса через газовую фазу, так и дополнительным потоком реагентов по поверхности маски. Моделирование массопереноса при локальной эпитаксии проводилось и ранее [7–9], однако при расчетах авторы пренебрегли искажением поля концентрации лимитирующего компонента в пограничном диффузионном слое вблизи открытой поверхности, что, вообще говоря, не давало возможности провести верное количественное сравнение вкладов объемного и поверхностного массопереносов в увеличение скорости роста.

Цель данной работы теоретическое изучение влияния маски на скорость роста эпитаксиальных слоев при ЛГФЭ как при учете поверхностной диффузии по маске, так и без такого учета.

2. Основные уравнения

Пусть маска представляет собой периодическую (период структуры $2l$) систему полосок толщиной $2a$ (рис. 1, *a*).

Будем считать, что скорость роста определяется диффузионным массопереносом одного из компонентов (например, триметилгаллия), концентрацию которого в толще пограничного слоя обозначим $C(x, z)$. Например, в случае GaAs, получаемого методом ГФЭ, таким компонентом является триметилгаллий.

Пусть b — толщина неподвижного пограничного слоя. Разделение на свободно движущийся газ и неподвижный пограничный слой несколько условно, поскольку скорость течения газа у поверхности твердого тела плавно меняется с увеличением расстояния от поверхности твердого тела [1]. В связи с этим возникает вопрос, что выбрать в качестве толщины пограничного слоя при проведении моделирования. Эту трудность можно преодолеть следующим образом. Как будет показано далее, в случае, если толщина пограничного слоя значительно больше, чем пространственный период структуры, то рассчитанная скорость роста не зависит от толщины пограничного слоя. Реальные планарные размеры выращиваемых элементов (единицы или десятки микрон [5,6]) значительно меньше, чем толщина слоя газа, в котором диффузионный массоперенос преобладает над конвективным (см. Приложение).

Следует отметить, что длины свободного пробега молекул при процессах ГФЭ значительно меньше, чем характерные размеры рисунка маски (например, при нормальных условиях длина свободного пробега имеет порядок 1 нм), что позволяет использовать модель сплошной среды.

Распределение концентрации реагента в толще пограничного слоя (рис. 1, *b*) описывается решением двумерного уравнения Лапласа

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} = 0. \quad (1)$$

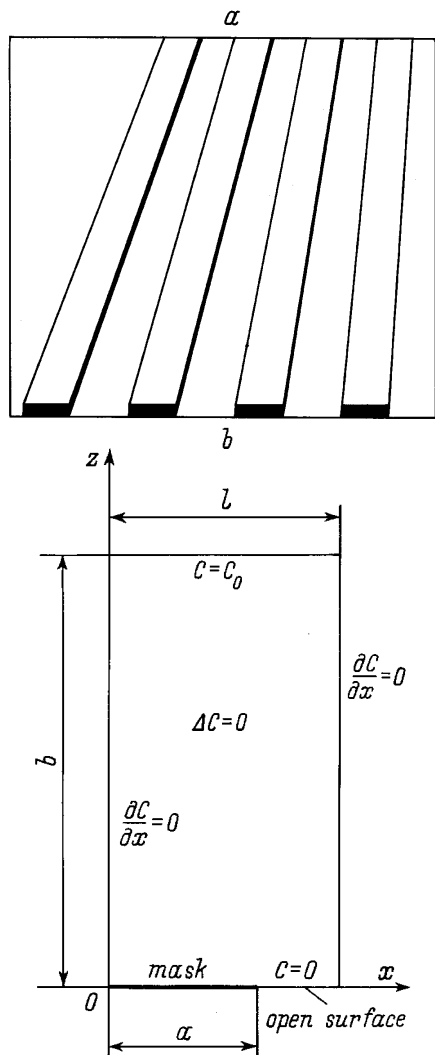


Рис. 1. a — схематическое изображение структуры; b — схема структуры, постановка задачи, граничные условия.

Вследствие периодичности структуры вдоль оси x , руководствуясь соображениями симметрии, можно поставить следующие граничные условия для концентрации:

$$\left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{x=l} = 0. \quad (2)$$

Концентрацию на границе пограничного слоя будем полагать равной концентрации лимитирующего компонента в парогазовой смеси C_0 :

$$C|_{z=b} = C_0, \quad (3)$$

а концентрацию на открытой поверхности подложки будем полагать равной 0 (т. е. скорость адсорбции и разложения лимитирующего компонента на открытой поверхности достаточно велика). Будем также считать, что реагенты, достигшие открытой поверхности, равномерно распределяются по ней.

Рассмотрим массоперенос по поверхности маски. Будем полагать, что лимитирующий реагент может адсорбироваться на поверхность маски без образования зародышей, причем для его поверхностной концентрации можно принять

$$C^{\text{surf}} = kC, \quad (4)$$

где C^{surf} — поверхностная концентрация, k — коэффициент пропорциональности.

Движение реагентов по поверхности маски можно описать уравнением диффузии, учитывая при этом возможность массообмена между объемом и поверхностью:

$$D^{\text{bulk}} \left. \frac{\partial C}{\partial z} \right|_{z=0} = D^{\text{surf}} \left. \frac{\partial^2 C^{\text{surf}}}{\partial x^2} \right|_{z=0}, \quad (5)$$

где член $D^{\text{bulk}} \frac{\partial C}{\partial z}$ описывает диффузионный поток из пограничного слоя на поверхность маски (D^{bulk} — коэффициент объемной диффузии).

Учтем конечную, отличную от единицы, вероятность прохождения частицей реагента границы маска-подложка:

$$\left. \frac{\partial C^{\text{surf}}}{\partial x} \right|_{x=a} = g C^{\text{surf}} \left. \frac{\partial C^{\text{surf}}}{\partial x} \right|_{x=a}. \quad (6)$$

Здесь g — коэффициент, пропорциональный вероятности прохождения частицей реагента через границу маска-открытая поверхность. Если все молекулы, достигшие границы раздела переходят на открытую поверхность подложки, то граничное условие на границе раздела маска-подложка записывается в виде

$$C^{\text{surf}} \Big|_{z=0} = 0. \quad (7)$$

Подставляя (4) в (5), получаем

$$\left. \frac{\partial C}{\partial z} \right|_{z=0} = D \left. \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right|_{z=0}, \quad (8)$$

где $D = \frac{kD^{\text{surf}}}{D^{\text{bulk}}}$.

Относительная скорость роста R_g (т. е. отношение роста на маскированной подложке к скорости роста на немаскированной подложке при прочих равных параметрах) находится как

$$R_g = \frac{l}{l-a} \frac{\int_0^l (\partial C / \partial z) \Big|_{z=b} dx}{l/b}. \quad (9)$$

Видно, что относительная скорость роста R_g зависит от дизайна структуры (параметров a , l), толщины пограничного слоя b и параметров g и D , характеризующих поверхностную диффузию (отметим, что все эти параметры имеют размерность длины). Для анализа результатов удобно перейти к безразмерным параметрам β , γ , Δ , нормировав b , g и D на половину планарного периода структуры l и введя фактор заполнения F_0 , характеризующий относительную долю открытой поверхности:

$$F_0 = (l-a)/l, \quad \beta = b/l, \quad \gamma = g/l, \quad \Delta = D/l.$$

3. Результаты и обсуждение

На рис. 2 показаны зависимости относительной скорости роста от толщины пограничного слоя β для различных факторов заполнения F_0 и параметров, характеризующих поверхностную диффузию. Можно видеть, что во всех случаях это насыщающаяся зависимость, причем насыщение достигается, когда толщина пограничного слоя превосходит пространственный период структуры примерно в 10 раз. В случае, когда толщина пограничного слоя много больше, чем пространственный период структуры, относительная скорость роста не зависит от параметра β . Это важный для практики случай, и далее мы будем исследовать поведение скорости роста только при больших значениях β .

На рис. 3 показаны зависимости относительной скорости роста R_g от параметра Δ , характеризующего поверхностную диффузию. Зависимость, естественно, имеет насыщающийся вид. Насыщение соответствует ситуации, когда поверхностный массоперенос столь эффективен, что объемная концентрация у поверхности маски стремится к 0.

На рис. 4 показаны зависимости относительной скорости роста R_g от параметра γ , характеризующего вероятность прохождения абсорбированной на поверхность маски частицей границы маска-открытая поверхность. Значение γ , равное 0, соответствует закрытию канала массопереноса по поверхности маски. Большие значения параметра γ соответствуют отсутствию какой-либо

преграды для диффундирующих по маске частиц на ее границе, поэтому рассматриваемая зависимость также имеет насыщающийся вид. Насыщение достигается при γ , больших 0.1.

В заключение обратимся к изучению зависимости относительной скорости роста R_g от соотношения размеров маски и открытой поверхности, которой может произвольно задаваться и точно контролироваться в эксперименте. На рис. 5 показаны результаты наших расчетов и экспериментальные данные из работы [5]. Кривая 1 — результат расчета, когда поверхностной диффузии нет, кривая 3 — результат расчета в случае эффективной поверхностной диффузии (эта кривая практически повторяет гиперболу $1/F_0$), кривая 2 — результат расчета для промежуточного случая. Видно, что чем меньше фактор заполнения F_0 , тем интенсивнее поверхностная диффузия должна увеличить скорость роста.

Сравнение экспериментальных результатов из работы [5] (показанных кружками) с расчетными данными позволяют заключить, что в системе, изучаемой в [5], поверхностная диффузия, по-видимому, была не существенна, так как экспериментально определенные величины относительной скорости роста не превосходят величин R_g , рассчитанных для случая нулевого поверхностного массопереноса. Нужно сказать, что в [5] делается утверждение о том, что увеличение относительной скорости роста R_g обусловлено главным образом дополнительным массопереносом лимитирующего компонента по маске,

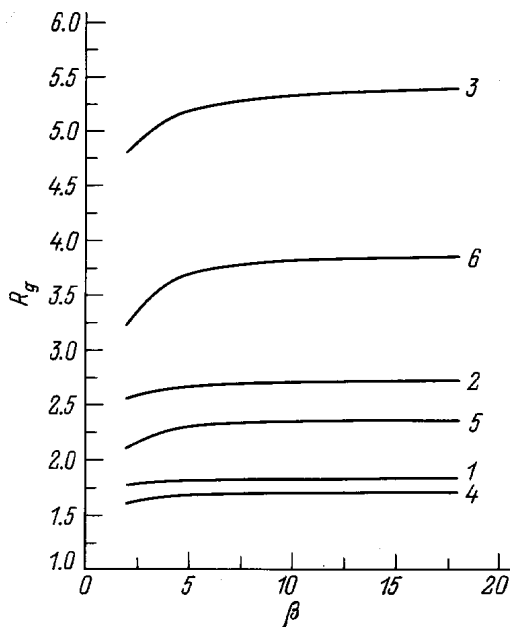


Рис. 2. Зависимость относительной скорости роста R_g от относительной толщины пограничного слоя β при следующих значениях параметров: 1 — $F_0 = 0.55$, $\Delta = 2.0$, $\gamma = 1.0$; 2 — $F_0 = 0.36$, $\Delta = 2.0$, $\gamma = 1.0$; 3 — $F_0 = 0.18$, $\Delta = 2.0$, $\gamma = 1.0$; 4 — $F_0 = 0.55$, $\Delta = 0$, $\gamma = 0$; 5 — $F_0 = 0.36$, $\Delta = 0$, $\gamma = 0$; 6 — $F_0 = 0.18$, $\Delta = 0$, $\gamma = 0$.

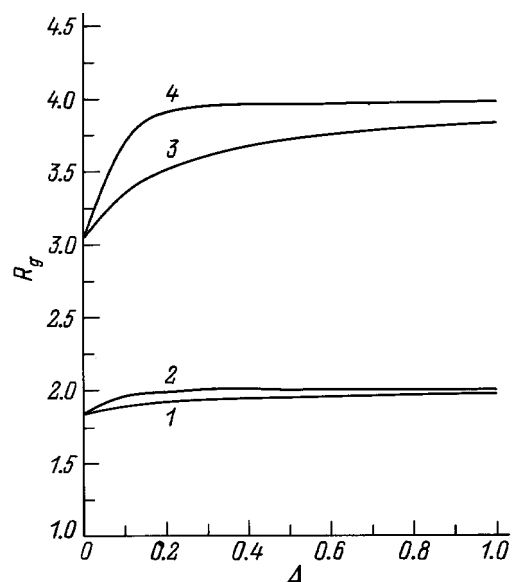


Рис. 3. Зависимость относительной скорости роста R_g от относительного коэффициента поверхностной диффузии Δ при относительной толщине пограничного слоя $\beta = 100$ и следующих значениях параметров: 1 — $F_0 = 0.5$, $\gamma = 0.1$; 2 — $F_0 = 0.5$, $\gamma = 1$; 3 — $F_0 = 0.25$, $\gamma = 0.1$; 4 — $F_0 = 0.25$, $\gamma = 1$.

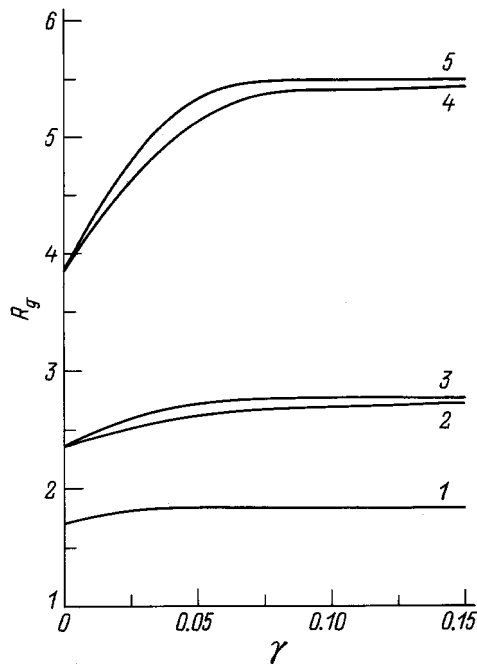


Рис. 4. Зависимость относительной скорости роста R_g от параметра γ при относительной толщине пограничного слоя $\beta = 100$ и следующих значениях параметров: 1 — $F_0 = 0.55$, $\Delta = 2.0$; 2 — $F_0 = 0.36$, $\Delta = 0.3$; 3 — $F_0 = 0.36$, $\Delta = 2.0$; 4 — $F_0 = 0.18$, $\Delta = 0.3$; 5 — $F_0 = 0.18$, $\Delta = 2.0$.

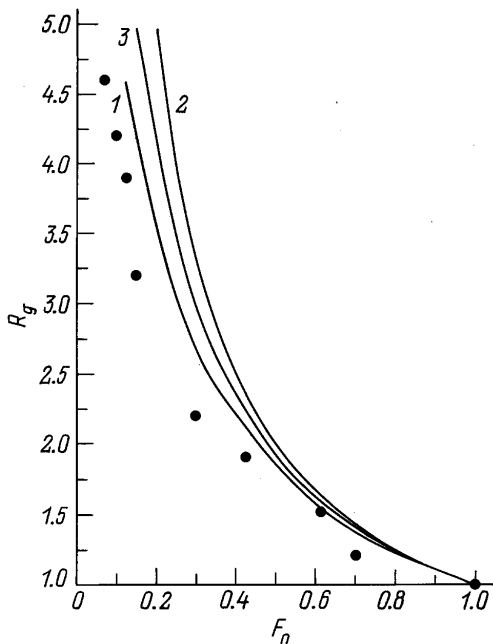


Рис. 5. Зависимость относительной скорости роста R_g от фактора заполнения F_0 при относительной толщине пограничного слоя $\beta = 100$ и следующих значениях параметров, характеризующих поверхностную диффузию: 1 — $\Delta = 0.0$ (поверхностная диффузия отсутствует); 2 — $\Delta = 1.0$, $\gamma = 1.0$ (эффективная поверхностная диффузия); 3 — $\Delta = 0.3$, $\gamma = 0.1$; кружки — экспериментальные данные [5].

хотя авторы [5] не подкрепляют это утверждение какими-либо расчетами.

Основные результаты представленной работы заключаются в следующем.

1. В диффузионном режиме численно рассчитана относительная скорость роста при локальной газофазной эпитаксии с использованием маски как при учете поверхностной диффузии, так и без такого учета.

2. Проанализировано влияние дизайна структуры, толщины пограничного слоя, поверхностной диффузии по маске на относительную скорость роста.

3. Показано, что при больших значениях толщины пограничного слоя относительная скорость роста (в случае периодической маски) не зависит от этой толщины.

4. Проведенные расчеты позволяют сделать предположение о том, что наблюдаемое при локальной газофазной эпитаксии увеличение скорости роста обусловлено не дополнительным потоком реагентов по поверхности маски, а увеличением диффузионного потока из газовой фазы.

Авторы считают необходимым поблагодарить Р.А. Сурица и А.Ю. Каминского за полезные обсуждения.

Приложение

Как правило, процессы газофазной эпитаксии осуществляются в диффузионном режиме, при котором скорость роста определяется диффузией одного из компонентов через неподвижный пограничный слой. Такая модель является упрощенной, поскольку скорость газового потока, омывающего твердую поверхность, меняется при изменении расстояния от поверхности плавно, а не скачкообразно [10]. Характер этой зависимости определяется конкретной геометрией реактора. Тем не менее, при расчетах можно пользоваться представлением о "неподвижном" пограничном слое вблизи поверхности [10]. Применительно к данной задаче характерной толщиной пограничного слоя является расстояние, на котором диффузионный поток доминирует над конвективным. Естественной оценкой этого расстояния является отношение D^{bulk}/u_0 , где u_0 — характерная скорость газового потока в реакторе.

В таблице приведены величины, характеризующие пограничный слой вблизи подложкодержателя в реакторе при типичном процессе ГФЭ, проводимом при атмосферном и пониженном давлении. При расчете использовались приближенные формулы, приведенные в [10], и значения коэффициента объемной диффузии, приведенные в [8] при следующих предположениях: расход газа-носителя (водорода) $100 \text{ см}^3/\text{с}$, площадь поперечного сечения реактора 10 см^2 , линейные размеры подложкодержателя порядка 10 см , температура процесса 630°C , как и в работе [5]. Можно видеть, что толщина пограничного слоя, вычисленная по упрощенной формуле из [10], имеет порядок 1 см . Того же порядка и отношение D^{bulk}/u_0 , характеризующее толщину слоя, в

Давление в реакторе P , атм.	1	0.1	0.02
Коэффициент объемной диффузии D^{bulk} , см ² /с	3	30	150
Скорость газового потока u_0 , см/с	10	100	500
Вязкость, см ² /с	0.2	2	10
Толщина пограничного слоя b , см	0.9	1.2	0.7
D^{bulk}/u_0 , см	0.3	0.3	0.3

котором массоперенос реагента осуществляется в основном за счет диффузии. В случае, когда пространственный период рисунка маски существенно меньше толщины пограничного слоя (этот случай реализуется в [5]), то относительное увеличение скорости роста не зависит от толщины пограничного слоя, и при расчетах вместо его, как правило, неизвестной конкретной величины можно использовать произвольную толщину, значительно превышающую период рисунка маски.

Список литературы

- [1] J.P. Duchemin, M. Bonnet, F.Kielsch, D. Huyghe. *J. Cryst. Growth*, **45**, 181 (1978).
- [2] K. Kamon, S. Takagish, H. Mori. *J. Cryst. Growth*, **73**, 73 (1985).
- [3] K. Kamon, M. Shimazu, K. Kimura, M. Mihara, M. Ishii. *J. Cryst. Growth*, **77**, 297 (1986).
- [4] G.B. Stringfellow. *J. Cryst. Growth*, **68**, 111 (1984).
- [5] Y.D. Galeuchet, P. Roentgen, V. Graft. *J. Appl. Phys.*, **68**, 560 (1990).
- [6] T. Sasaki, M. Kitamura, I. Mito. *J. Cryst. Growth*, **132**, 435 (1993).
- [7] D.G. Coronell, K.F. Jensen. *J. Cryst. Growth*, **114**, 581 (1991).
- [8] K. Yamaguchi, M. Ogasawara, K. Okamoto. *J. Appl. Phys.*, **72**, 5919 (1992).
- [9] Yu.N. Makarov, M.S. Ramm, E.A. Subashieva, A.I. Zhmakin. *J. Cryst. Growth*, **145**, 271 (1994).
- [10] Г. Шлихтинг. *Теория пограничного слоя* (М., Наука) с. 134.

Редактор В.В. Чалдышев

L.B. Proekt, M.A. Kaliteevski, V.B. Kantor,
D.A. Piotrovski, M.A. Sinitsyn, B.S. Yavivh

Mass transport modeling in a selective area vapor phase epitaxy

A.F. Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St.Petersburg, Russia

Abstract Numerical simulation of diffusion mass transport in a selective area vapor phase epitaxy through the mask has been performed. Influence of growth precursor sticking on the mask surface and their surface diffusion were investigated. Results of the calculations have been compared with experimental data given in literature.

fax 7 812 2471017