Исследование влияния формы маски на пространственное распределение скорости роста слоев GaAs, полученных методом МОС-гидридной селективной эпитаксии

© А.Е. Маричев, В.В. Шамахов, А.Е. Гришин, С.О. Слипченко, Н.А. Пихтин

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

E-mail: aemarichev@mail.ioffe.ru

Поступила в Редакцию 14 октября 2025 г.
В окончательной редакции 13 ноября 2025 г.
Принята к публикации 14 ноября 2025 г.

В рамках численной модели газофазной диффузии исследовано влияние формы (квадрат, круг, ромб) и размера (2–10 мкм) масок на пространственное распределение скорости роста слоев GaAs, полученных методом МОС-гидридной селективной эпитаксии. Установлено, что для масок с окнами квадратной формы возрастание скорости роста изменяется по периметру неоднородно: минимально в центре стороны квадрата и возрастает при движении к вершинам квадрата, при этом максимальная разница достигает 2.4 %. Снижение разницы возрастания скорости роста для окна квадратной формы может быть обеспечено за счет использования маски в форме ромба. Использование масок с окнами круглой формы обеспечивает минимальное изменение возрастания скорости роста при смещении от центра к краю, при этом скорость роста однородна по всему периметру. Показано, что наименьшее изменение возрастания скорости роста между центром окна и краем наблюдается при минимальных значениях ширин маски-окна и равно 0.328 % для маски круглой формы.

Ключевые слова: модель, газофазная диффузия, селективная эпитаксия, прирост скорости роста, окна, маска.

DOI: 10.61011/FTP.2025.08.62186.8457

1. Введение

В настоящее время активно развиваются фотонные интегральные схемы, требующие монолитной интеграции активных элементов, таких как лазеры, модуляторы, волноводы и фотодетекторы [1–6]. Одним из эффективных решений этой задачи может выступать селективная эпитаксия [7,8]. Селективная эпитаксия — контролируемое пространственно-локализованное эпитаксиальное выращивание структуры с необходимыми параметрами, сочетающее в себе преимущества эпитаксиального роста и литографии. Принцип селективной эпитаксии основан на том, что на предварительно подготовленной подложке создается рисунок, состоящий из открытых окон, куда происходит осаждение материала и областей, закрытых диэлектрической маской (например, SiO_2), где при определенных технологических параметрах (например, давление в реакторе и температура роста) осаждение материала не происходит [9]. Селективный рост состоит из трех процессов. Частицы вещества, которые достигают области окна, подвергаются реакции пиролиза и участвуют в росте эпитаксиального слоя. Частицы вещества, достигающие маски, могут либо адсорбироваться на поверхность маски и мигрировать к области окна за счет поверхностной диффузии, либо за короткое время десорбироваться с поверхности маски. Десорбированные частицы возвращаются в газовую фазу и за счет возникающего градиента концентраций между маской и окном будут диффундировать в газовой фазе в сторону окна. Селективный процесс роста определяется суммарным вкладом процессов диффузии по поверхности маски и диффузии в газовой фазе [3]. Эти процессы дают прирост скорости роста относительно скорости роста стандартной эпитаксии на планарной поверхности без масок. При этом для слоев, полученных методом селективной эпитаксии, формируется неоднородное распределение толщины и состава (в случае тройных или четверных твердых растворов) по площади окна [10,11]. Поэтому прогнозирование параметров слоев, полученных селективной эпитаксией, является важной задачей. Для прогнозирования свойств слоев, полученных селективной эпитаксией при помощи технологии МОС-гидридной эпитаксии, используется модель газофазной диффузии [7,12]. Данная модель в основном используется для бесконечных полосок с шириной окна от единиц до сотен микрометров [10,13,14], а также квадратных окон с шириной в сотни микрометров [15]. При этом для метода МОС-гидридной эпитаксии доминирующим процессом является диффузия в газовой фазе. Это связано с тем, что диффузионная длина в газовой фазе достигает 100 микрометров, что существенно больше, чем поверхностная диффузионная длина, составляющая единицы микрометров [16,17]. Поверхностная диффузия по маске может вносить вклад при ширинах маски, соизмеримых с длиной поверхностной диффузии, т.е. единицы микрометров. Для ее учета модель необходимо дополнить параметрами, значение которых требуется определять из экспериментов. В настоящее время такие

экспериментальные параметры недоступны. В рамках данной статьи используется модель, которая ранее была верифицирована для описания роста при селективной эпитаксии в широких окнах и продемонстрировала достаточно хорошее совпадение расчетных результатов с экспериментальными данными [10].

В данной работе исследовалось распределение толщины слоя GaAs в окнах квадратной и круглой формы, шириной от 2 до 10 мкм, ограниченных маской шириной от 2 до 10 мкм. Задача состояла в выявлении закономерностей изменения профиля толщины с целью получения минимального перепада толщины слоя между центром и краем окна. Наименьшее изменение профиля толщины слоя по ширине окна должно позволить в дальнейшем согласовывать различные элементы фотонных интегральных схем с волноводами, а также сформировать наиболее благоприятные условия для роста однородных активных областей на основе напряженных квантовых ям.

2. Модель газофазной диффузии

Процесс селективной эпитаксии, реализованный в рамках технологий МОС-гидридной эпитаксии, может быть описан с использованием модели газофазной диффузии [18]. В основе модели лежит расчет профиля концентрации частиц вещества в газовой фазе над поверхностью подложки. 3D профиль распределения концентрации частиц вещества над подложкой определяется решением уравнения Лапласа в пограничном слое:

$$\frac{\partial^2 N}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 N}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 N}{\partial z^2} = 0, \tag{1}$$

где N — концентрация прекурсора, x — координата в направлении поперек окна, y — координата в направлении вдоль окна, z — координата в направлении, перпендикулярном плоскости роста.

На рис. 1 представлена схема, поясняющая граничные условия для расчета процесса селективной эпитаксии в рамках модели газофазной диффузии.

Граничные условия на краях окна и пограничного слоя можно записать следующим образом (рис. 1):

– на поверхности маски не происходит роста:

$$\left.\frac{\partial N}{\partial z}\right|_{z=0} = 0; \tag{2}$$

– концентрация прекурсора в рамках пограничного слоя не изменяется в боковых направлениях:

$$\left.\frac{\partial N}{\partial x}\right|_{z=0} = 0; \tag{3}$$

– верхняя часть пограничного слоя находится на достаточно большом расстоянии от подложки, чтобы избежать возмущений, вносимых маской:

$$N(M) = N_0, \tag{4}$$

где N_0 — концентрация прекурсора на верхней границе пограничного слоя, которая является постоянной;

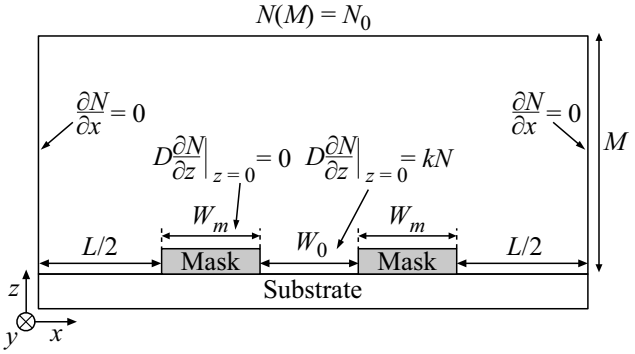

Рис. 1. Схематическое изображение для 3D модели газофазной диффузии, где k — постоянная поверхностной реакции; D — коэффициент диффузии прекурсора.

– процесс роста на области без маски определяется выражением:

$$\left.\frac{\partial N}{\partial z}\right|_{z=0} = \frac{k}{D} N\Big|_{z=0}. \tag{5}$$

Профиль концентрации прекурсора определяется параметром D/k, который можно рассматривать как эффективную длину диффузии. D/k может быть оценено либо теоретическим расчетом [18], либо путем подгонки экспериментального результата.

Для оценки профиля скорости роста слоя, выращенного в окне маски, используют понятие возрастания скорости роста (growth rate enhancement (GRE)). GRE характеризует, как изменяется скорость роста слоя при селективной эпитаксии относительно скорости роста при осаждении на подложку без маски. GRE рассчитывается согласно формуле

$$\mathrm{GRE} = \frac{H}{H_p} = \frac{V}{V_p} = \frac{N}{N_0}\left(1 + \frac{M}{D/k}\right), \tag{6}$$

где H и H_p — толщина селективно выращенного слоя и стандартно выращенного слоя соответственно; V и V_p — скорость селективно выращенного слоя и стандартно выращенного слоя соответственно.

3. Моделирование и обсуждение результатов

Моделирование проводилось для группы элементов отдельно круглой или квадратной формы, ограниченных маской. Форма элементов и маски показана на рис. 2. При расчетах значение L (расстояние между соседними фигурами) бралось равным 500 мкм для того, чтобы исключить влияние элементов друг на друга. Для анализа влияния размеров маски значения W_0 (ширина окна) и W_m (ширина маски) выбирались 2, 5 и 10 мкм, значение $D/k = 85$ мкм для Ga [10].

Высота пограничного слоя M выбиралась из результатов моделирования влияния высоты пограничного слоя

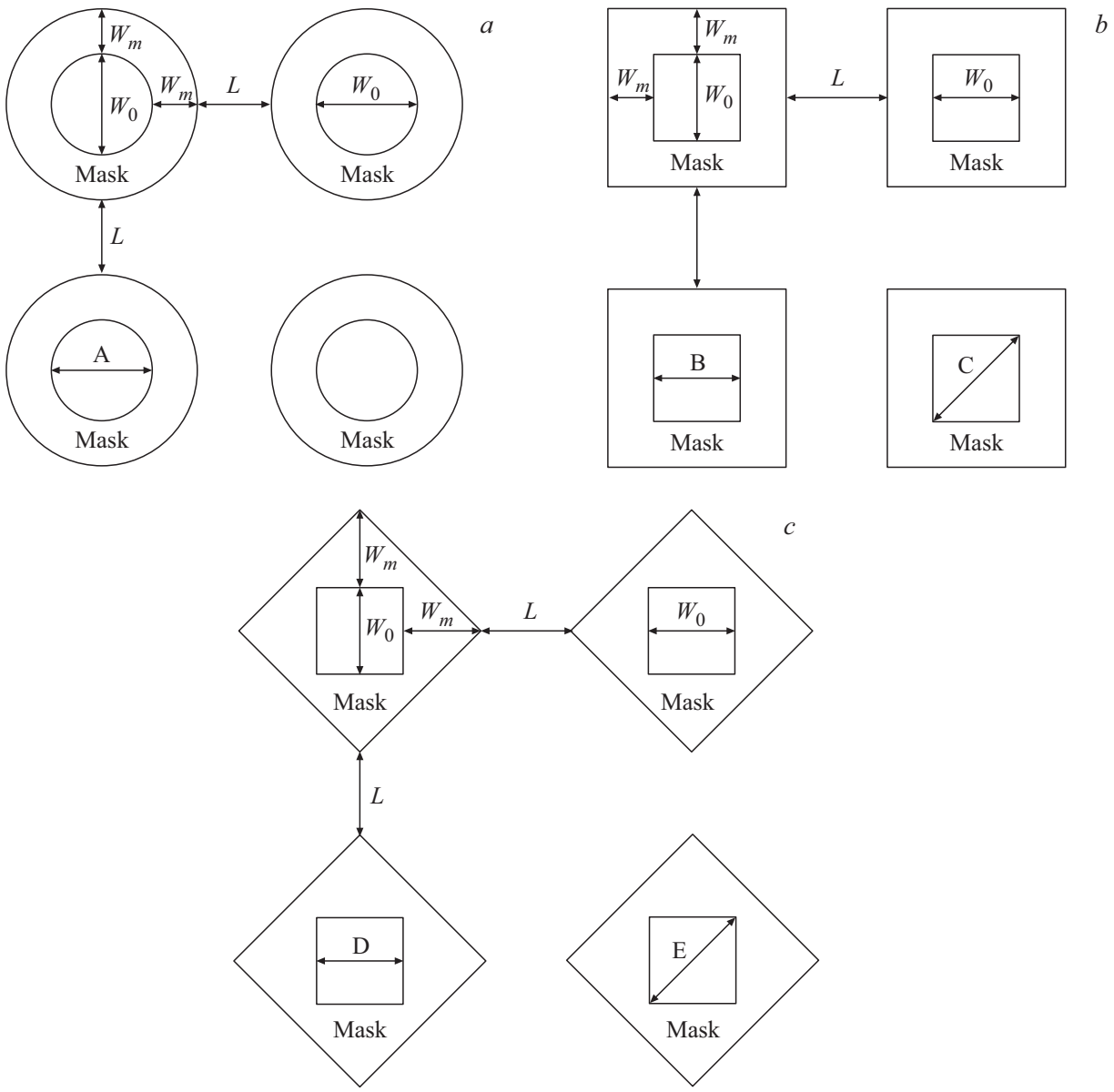

Рис. 2. Конфигурация элементов для расчета GRE: *a* — окна и маски в виде круга; *b* — окна и маски в форме квадрата; *c* — окна в форме квадрата и маски в форме ромба (квадрат, повернутый на 45°).

на GRE [10]. Так, с увеличением толщины пограничного слоя наблюдается сильное уменьшение влияния высоты на максимальное GRE. При толщине M больше 1500 мкм не наблюдается изменения GRE для масок 2/2, 5/5 и 10/10 мкм.

На рис. 3 представлены результаты расчетов GRE в круглом и квадратном окнах для GaAs. Из рисунка видно, что минимальное значение GRE приходится на центр окна, и по мере приближения к границе окно/маска значение GRE возрастает. При этом для круглых окон (рис. 3, *a*) GRE одинаково по всему периметру окна. Для квадратного окна (рис. 3, *b*) GRE по периметру окна меняется от минимального значения в центре стороны квадрата до максимального в вершине квадрата. А именно для квадратного окна максимальное значение GRE достигается в локальных областях, соответствующих вершинам квадрата. Таким образом, при формировании напряженных слоев в квадратном окне лимитирующим фактором является значение GRE в вершинах на границе окно/маска.

Для выбора оптимального соотношения W_0 и W_m нами был проведен анализ изменения GRE между центром окна и на краю окна:

$$\Delta\mathrm{GRE} = \left|\frac{\mathrm{GRE}_0 - \mathrm{GRE}_1}{\mathrm{GRE}_0}\right| 100\,\%, \qquad (7)$$

где GRE_0, GRE_1 — значения GRE в центре и на краю окна соответственно.

Наиболее предпочтительный вариант, когда изменение GRE между центром и краем окна минимально. На

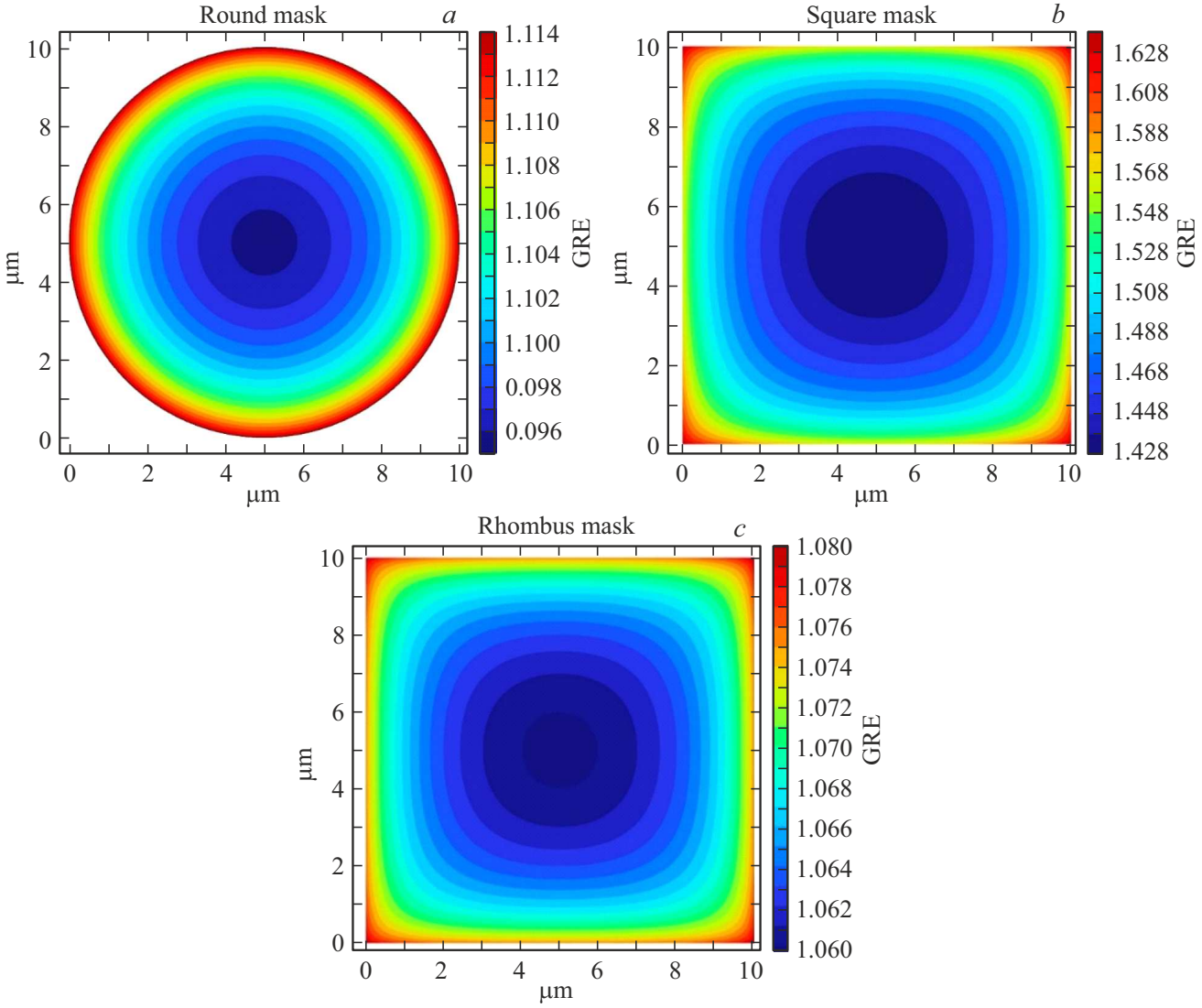

Рис. 3. Результаты расчетов GRE с параметрами W_0 и W_m, равными 10 мкм, для: *a* — окна и маски в виде круга; *b* — окна и маски в форме квадрата; *c* — окна в форме квадрата и маски в форме ромба.

рис. 4 представлены карты изменения ΔGRE для круглого и квадратного окна при различных значениях W_0 и W_m. Из карт видно, что при фиксированном значении W_m величина ΔGRE возрастает с увеличением W_0. Также из полученных карт видно, что при фиксированном значении W_0 величина ΔGRE возрастает с увеличением W_m. При этом ΔGRE имеет более сильное изменение от W_m для более крупных окон (W_0). Таким образом, можно сделать заключение, что наименьшее изменение ΔGRE происходит при минимальных значениях W_0 и W_m. При сравнении окон разной формы видно, что в круглом окне (рис. 4, *a*) ΔGRE меньше, чем ΔGRE для квадратного окна (рис. 4, *c*) между центром окна и вершиной на границе окно/маска. Поэтому с точки зрения получения более однородных слоев является использование окна и маски в виде круга.

Из рис. 3, *b* и *c* видно, что при одинаковой форме окна различие между значениями ΔGRE зависит от формы маски. Так, для маски в форме ромба (рис. 3, *c*) разница между *Delta*GRE в сечениях D и E (рис. 2, *c*) меньше, чем разница между ΔGRE в сечениях B и C (рис. 2, *b*) для квадратной маски (рис. 3, *b*). Таким образом, можно сделать заключение, что при использовании окна квадратной формы наиболее предпочтительным вариантом является маска в форме ромба — квадрат, повернутый на 45° относительно окна.

4. Заключение

Проведенные расчеты в рамках модели газофазной диффузии показали, что оптимальными являются окна с маской в виде круга по сравнению с квадратными окнами и маской, так как изменение GRE в таких окнах минимально и однородно по всему периметру окна, в то время как для квадратного окна GRE изменяется

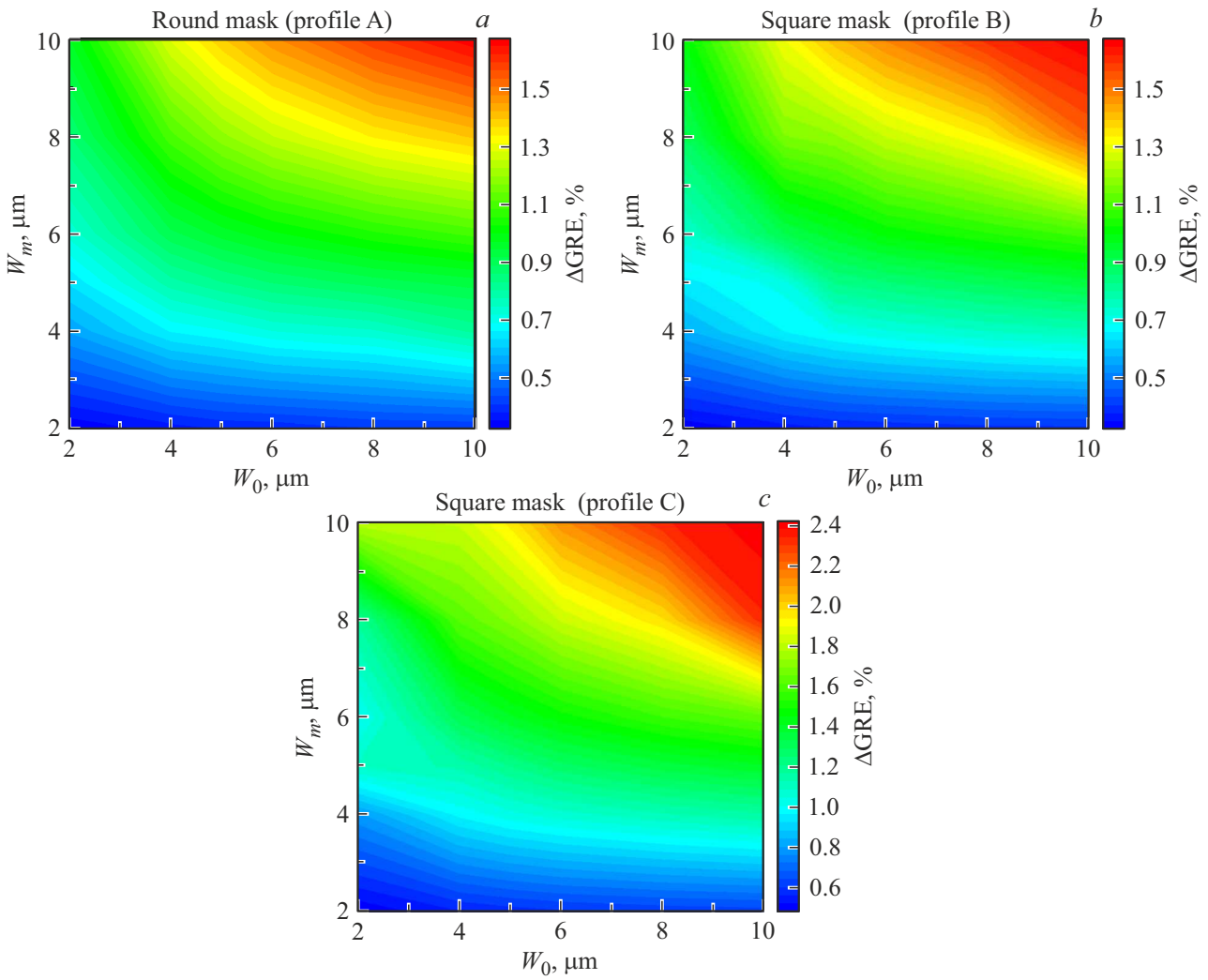

Рис. 4. Карта изменения ΔGRE в окне в зависимости от W_m и W_0: *a* — круглое окно (сечение A на рис. 2, *a*); *b* и *c* — квадратное окно (сечения B и C на рис. 2, *b*).

по периметру неоднородно: минимально в центре стороны квадрата и возрастает при движении к вершинам квадрата. Также показано, что наименьшее изменение GRE между центром окна и краем наблюдается при минимальных значениях ширин окна и маски.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] P. Zhang. Proc. 4th Int. Conf. on Materials Chemistry and Environmental Engineering, **84** (1), 146 (2024).
[2] M.A. Butt, B. Janaszek, R. Piramidowicz. Sensors International, **6**, 100326 (2025).
[3] F. Lemaitre. Phd Thesis (Gonesse, Technische Universiteit Eindhoven, 2019).
[4] M. Smit, K. Williams, J. van der Tol. APL Photonics, **4**, 050901 (2019).
[5] B.M. Bersch, S.M. Eichfeld, Y.-C. Lin, K. Zhang, G.R. Bhimanapati, A.F. Piasecki, M. Labella, J.A. Robinson. 2D Mater., **4**, 025083 (2017).
[6] Y.-T. Lin, T.W. Yeh, P.D. Dapkus. Nanotechnology, **23**, 465601 (2012).
[7] J.D. Kim, X. Chen, J.J. Coleman. *Handbook of Crystal Growth*, 441–481 (2015).
[8] X. Yuan, D. Pan, Y. Zhou, X. Zhang, K. Peng, B. Zhao, M. Deng, J. He, H.H. Tan, C. Jagadish. Appl. Phys. Rev., **8** (2), 021302 (2021).
[9] G.J. Davies, W.J. Duncan, P.J. Skevington, C.L. French, J.S. Foord. Mater. Sci. Eng. B, **9** (1-3), 93 (1991).
[10] V. Shamakhov, S. Slipchenko, D. Nikolaev, I. Soshnikov, A. Smirnov, I. Eliseyev, A. Grishin, M. Kondratov, A. Rizaev, N. Pikhtin, P. Kop'ev. Technologies, **11** (4), 89 (2023).
[11] V. Shamakhov, S. Slipchenko, D. Nikolaev, A. Smirnov, I. Eliseyev, A. Grishin, M. Kondratov, I. Shashkin, N. Pikhtin. Nanomaterials, **13** (17), 2386 (2023).
[12] B. Wang, Y. Zeng, Y. Song, Y. Wang, L. Liang, L. Qin, J. Zhang, P. Jia, Y. Lei, C. Qiu, Y. Ning, L. Wang. Crystals, **12** (7), 1011 (2022).

[13] K.-L. Amaguchi, K. Okamoto. Jpn. J. Appl. Phys., **32**, 1523 (1993).
[14] M. Sugiyama. 22nd Int. Conf. on Indium Phosphide and Related Materials (IPRM), Kagawa, **1** (2010).
[15] T.M. Cockerill, D.V. Forbes, J.A. Dantzig, J.J. Coleman. IEEE J. Quant. Electron., **30** (2), 441 (1994).
[16] N. Dupuis, J. Décobert, P.-Y. Lagrée, N. Lagay, F. Poingt, C. Kazmierski, A. Ramdane, A. Ougazzaden. J. Appl. Phys., **103**, 113113 (2008).
[17] Xingyu Zhao, A.F. McKenzie, C.W. Munro, K.J. Hill, D. Kim, S.L. Bayliss, N.D. Gerrard, D.A. MacLaren, R.A. Hogg. J. Cryst. Growth, **603**, 127036 (2023).
[18] N. Dupuis, J. Decobert, P.Y. Lagreée, N. Lagay, C. Cuisin, F. Poingt, A. Ramdane, C. Kazmierski. IEE Proc. Optoelectron., **153** (6), 276 (2006).

Редактор Г.А. Оганесян

Study of the mask shape effect on the spatial distribution of GaAs layer growth rate in MOCVD selective area epitaxy

A.E. Marichev, V.V. Shamakhov, A.E. Grishin, S.O. Slipchenko, N.A. Pikhtin

Institute Ioffe,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract Within a numerical model of gas-phase diffusion, the influence of the shape (square, circle, rhomb) and size (from 2 to 10 μm) of masks on the spatial distribution of the GaAs layer growth rate in metal-organic chemical vapor deposition selective area epitaxy has been studied. It was found that the growth rate enhancement changes non-uniformly around the periphery of square-shaped mask windows: it is minimal at the center of the square's side and increases towards the vertices, with the maximum difference reaching 2.4 %. Reducing the growth rate enhancement difference for a square window can be achieved by using a rhomb-shaped mask. The use of masks with circular windows ensures a minimal difference in growth rate enhancement between the center and the edge with the growth rate uniform around the entire periphery. It is shown that the smallest difference in growth rate enhancement between the window center and the edge can be observed with minimum mask-window widths and is 0.328 % for a circular window.