

01;06;11

Моделирование профилей распределения индия в квантоворазмерных гетероструктурах InGaAs/GaAs

© Р.Х. Акчурин,¹ Л.Б. Берлинер,¹ А.А. Мармалюк²¹Московская государственная академия тонкой химической технологии им. М.В. Ломоносова, 119571 Москва, Россия

e-mail: akchurin@mitht.ru

²ООО „Сигм Плюс“,

117342 Москва, Россия

e-mail: marm@siplus.ru

(Поступило в Редакцию 18 июля 2005 г. В окончательной редакции 7 апреля 2006 г.)

Использован новый подход к описанию явлений, сопровождающих рост тонких эпитаксиальных слоев InGaAs методом гидридной эпитаксии металлоорганических соединений, в основе которого лежит представление приграничного слоя газовой фазы как квазижидкого. Разработана расчетная модель для построения концентрационных профилей компонентов в гетероструктурах с квантовыми ямами, базирующаяся на допущении существования вблизи межфазной границы состояния, близкого к термодинамическому равновесию. Моделирование концентрационных профилей осуществляется совместным решением уравнений, описывающих гетерогенные равновесия, и материального баланса на границе раздела фаз. Представлены результаты моделирования профилей распределения индия в квантоворазмерных гетероструктурах InGaAs/GaAs для варьируемых условий эпитаксиального процесса (температуры, соотношения компонентов в исходной газовой фазе, толщины приграничного слоя). Полученные результаты хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными.

PACS: 81.07.Ta

Введение

Квантоворазмерные гетероструктуры на основе InGaAs/GaAs находят применение в современной оптоэлектронике и инфракрасной технике. Основным методом массового производства таких структур является эпитаксия с использованием металлоорганических соединений (МОСГЭ) [1,2]. Для обеспечения требуемых характеристик приборных устройств важными параметрами гетероструктур являются однородность состава эпитаксиальных слоев (ЭС) и резкость формируемых гетерограниц. Многие авторы, однако, отмечают нежелательные искажения концентрационного профиля индия (сегрегацию индия) в квантовых ямах указанных гетероструктур, происходящие при получении их как методом МОСГЭ [3,4], так и с использованием различных вариантов молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) [5–7]. Это указывает на общую природу наблюдаемых сегрегационных явлений, вносящую, видимо, фундаментальный характер (подобные явления наблюдаются, например, и при формировании квантоворазмерных гетероструктур GaAsSb/GaAs [8], InGaN/GaN [9], GeSi/Si [10], AlInAs/InP [11], GaInP/GaAs [12] и др.).

В связи с этим выяснение причин наблюдаемого явления и разработка модели, позволяющей количественно описывать профили распределения компонентов в квантоворазмерных гетероструктурах при варьируемых условиях технологического процесса, является важной задачей, поскольку до настоящего времени при выборе условий проведения МОСГЭ преобладает затратный и трудоемкий эмпирический подход.

Для количественного описания наблюдаемых сегрегационных явлений разработано несколько расчетных моделей. Авторы [13] предложили для расчета профиля распределения индия в указанных гетероструктурах использовать экспоненциальную зависимость изменения его концентрации в процессе роста. Кинетическая модель, основанная на рассмотрении термоактивационных процессов обмена атомами индия и галлия между поверхностью и твердой фазой, была рассмотрена авторами [14]. Третья модель базируется на рассмотрении взаимодействия между атомами в приповерхностном слое твердой фазы с позиций теории регулярных растворов [10]. Авторы [15] предложили модель для расчета сегрегации In при МОСГЭ гетероструктур InGaAs, основанную на квазитермодинамическом подходе с учетом адсорбции и десорбции атомов, поступающих к поверхности кристаллизации.

Слабостью указанных расчетных моделей является необходимость использования ряда трудно определяемых подгоночных параметров, значения которых зависят от конкретных условий технологического процесса. Это снижает предсказательные возможности расчета и побуждает искать новые подходы к разработке модели, которая позволяла бы априори связывать характер изменения концентрационных профилей компонентов с изменением основных параметров эпитаксиального процесса.

Сложная совокупность различных факторов, сопровождающих процесс МОСГЭ (одновременное протекание в рабочем пространстве технологической установки реакций термического разложения исходных веществ,

образование ряда побочных продуктов, взаимодействие продуктов пиролиза между собой и с поверхностью кристаллизации, высокие температурные градиенты в рабочей зоне реактора, затрудняющие определение констант скорости протекающих в ней реакций), вынуждает при разработке расчетной модели идти на ряд допущений, позволяющих разумно упростить поставленную задачу.

Анализ совокупности опубликованных данных по проблеме сегрегации компонентов при создании квантоворазмерных гетероструктур позволяет выделить две главные причины наблюдаемых явлений. Первая, и, очевидно, главная, связана с общими физико-химическими особенностями кристаллизации твердых растворов, отражающимися в различии коэффициентов распределения образующих их компонентов. В несогласованных по параметру кристаллической решетки гетероструктурах дополнительный вклад в сегрегацию могут вносить упругие напряжения, приводящие к смещению гетерогенных равновесий за счет вклада упругой энергии в изменение свободной энергии системы в целом.

В данной работе на основе учета первой из указанных причин разработан новый подход к математическому моделированию концентрационных профилей в гетероструктурах, получаемых методом МОСГЭ, и приводятся результаты моделирования распределения индия по толщине квантовых ям в структурах InGaAs/GaAs.

Обоснование подхода и основные допущения

Описанный ниже подход применялся с привязкой к процессу эпитаксиального роста квантоворазмерных гетероструктур InGaAs/GaAs (100), производимого из газовой фазы в результате пиролиза $\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$, $\text{In}(\text{CH}_3)_3$ и AsH_3 на нагретой ($T = 650\text{--}850^\circ\text{C}$) подложке в проточном реакторе низкого давления ($\sim 8 \cdot 10^3$ Па) в потоке H_2 при многократном избытке арсина.

В основе предлагаемого подхода лежат следующие представления [16]:

- приграничный слой газовой фазы рассматривается как квазизжидкость,
- несмотря на сильное, в целом, отклонение условий МОСГЭ от равновесных, на межфазной границе существует состояние, близкое к термодинамическому равновесию.

При разработке описываемой модели принималось допущение о полном разложении источников при температуре эпитаксии $650\text{--}850^\circ\text{C}$. Хорошо известно, что процесс пиролиза, как правило, осуществляется путем протекания ряда последовательных реакций с образованием промежуточных продуктов. При этом эти реакции могут протекать как гомогенно в нагретой зоне вблизи поверхности роста, так и гетерогенно непосредственно на этой поверхности [1]. Полный учет всей совокупности указанных реакций сложен, да и вряд ли целесообразен

в рамках рассматриваемой задачи. Принимая указанное допущение, мы основывались на следующем:

1. Скорость протекания указанных промежуточных реакций при рассматриваемых температурах эпитаксии высока [1], дополнительным свидетельством чему может служить, в частности, успешная реализация таких процессов, как атомно-слоевая эпитаксия, при которой циклическая подача источников в реактор осуществляется в виде коротких импульсов.

2. Экспериментальные результаты, приведенные в [1], свидетельствуют, что устойчивость к пиролитическому разложению зависит от атмосферы, в которой осуществляется пиролиз. При пиролизе $\text{In}(\text{CH}_3)_3$ в атмосфере He, D_2 , толуола и H_2 температура его полного разложения лежит в интервале $350\text{--}400^\circ\text{C}$, причем нижнее значение соответствует атмосфере H_2 . Несмотря на то что некоторые из указанных результатов были получены в установках, отличных от используемых при МОСГЭ, температуры пиролиза значительно ниже тех, при которых осуществляется процесс эпитаксии (и которые способствуют существенному ускорению процесса пиролитического разложения). Аналогичные данные получены для $\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$: температура полного разложения в атмосфере H_2 несколько ниже, по сравнению с пиролизом в атмосфере He, и лежит в области $\sim 350\text{--}360^\circ\text{C}$. Следует при этом отметить, что в последнем случае результаты получены в экспериментах, соответствующих реальным процессам МОСГЭ: исследования проводились в установках как с горизонтальным реактором при атмосферном давлении [17], так и с вертикальным реактором при пониженном давлении [18]; при этом указанные температуры полного пиролиза $\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$ практически совпадают.

Принятое нами представление приграничного слоя газовой фазы как квазизжидкости основывается на сопоставлении равновесных давлений паров индия и галлия при температурах эпитаксии с их парциальными давлениями, возникающими в газофазном реакторе при полном разложении соответствующих источников. Из результатов расчетов [16] (рис. 1) видно, что парциальные давления этих элементов в реакторе МОСГЭ намного больше соответствующих равновесных давлений, при этом в рассматриваемом температурном интервале наиболее энергетически выгодным агрегатным состоянием для указанных веществ является жидкое. Следует также отметить, что взаимодействие между атомами A_3 и B_5 в приграничном (квазизжидком) слое газовой фазы снижает вероятность десорбции In за счет понижения его активности. На основе этого полагаем, что десорбция In из квазизжидкого слоя мала и не играет решающей роли. Косвенным подтверждением этого является наблюдаемая слабая зависимость концентрационных профилей от давления и скорости эпитаксиального роста [15].

Следует при этом отметить, что, как видно из рис. 1, с повышением температуры разница в значениях равновесного и парциального давления паров индия становится не столь значительной, и десорбция индия может стать заметной.

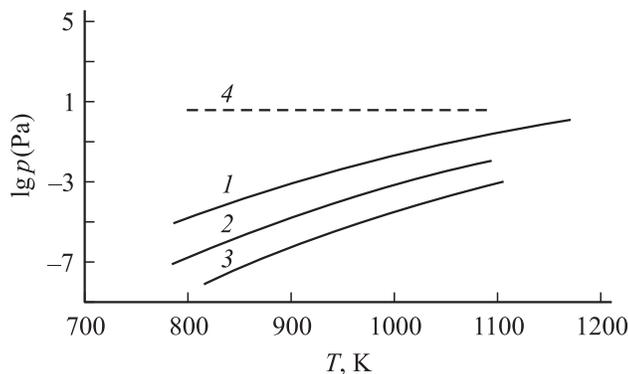


Рис. 1. Сопоставление равновесных (1–3) и парциальных (4) значений давления пара элементов A^3 в типичных условиях МОСГЭ, проводимой при низких давлениях p (1 — In, 2 — Ga, 3 — Al [1], 4 — расчетная оценка для $p \approx 8 \cdot 10^3$ Па) [15].

Для мышьяка при указанных температурах эпитаксиального роста равновесные давления паров значительно превышают парциальные в парогазовой смеси, поступающей в реактор. С учетом многократного избытка источника мышьяка, подаваемого в реактор, большая часть образующихся при разложении арсина атомов мышьяка уносится из реактора, не адсорбируясь на поверхности роста. При этом полагаем, что мышьяк усваивается квазижидким слоем в режиме саморегуляции в таком количестве, какое необходимо для приближения к равновесию.

Указанные допущения позволяют представить, что поступающие к подложке роста атомы индия и галлия, образуя пересыщенный пар, связываются с ее поверхностью слабыми силами физической адсорбции, а возникающий приграничный слой газа по своим свойствам близок к жидкости. Поскольку в такой „квазижидкости“ есть и атомы элементов пятой группы, то она имеет черты сходства с раствором-расплавом, который используется при жидкофазной эпитаксии. Состав же этого слоя может сильно отличаться от состава парогазовой смеси в объеме реактора.

Второе представление базируется на многочисленных экспериментальных подтверждениях близости условий на поверхности роста при МОСГЭ к условиям термодинамического равновесия [1]. С учетом этого концентрация мышьяка в квазижидком слое должна быть достаточно близка к равновесной при условиях проведения процесса МОС-гидридной эпитаксии.

Расчетная модель

Расчетная модель основывается на совместном решении уравнений, описывающих гетерогенные равновесия жидкость-твердое, характеризующих систему In–Ga–As, и уравнений материального баланса на межфазной границе. При расчете приняты следующие допущения:

1. Потоки всех газовых компонентов к поверхности подложки равномерны.

2. Состав квазижидкого слоя однороден по толщине. При типичных значениях коэффициента диффузии компонентов в жидкой фазе рассматриваемых составов $1-5 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ и предполагаемой толщине квазижидкого слоя 1–5 нм время диффузного выравнивания состава должно составлять $10^{-8}-10^{-9}$ с, т.е. пренебрежимо малую величину.

3. Поскольку константа равновесия реакции $\text{Ga} + (1/4)\text{As}_4 = \text{GaAs}$ на три порядка превосходит константу равновесия аналогичной реакции с индием [1], то временем установления стационарного количества атомов галлия в квазижидком слое (выхода потока галлия к поверхности роста на стационарный режим) можно пренебречь.

С учетом последнего допущения уравнение материального баланса по галлию, рассчитанного на единицу поверхности, запишется в виде

$$dN_{\text{Ga}}/dt = F_{\text{Ga}} - V_{\text{InGaAs}}(1-x)\rho(x)/M(x) = 0, \quad (1)$$

где N_{Ga} — количество галлия в квазижидком слое, $\text{mol} \cdot \text{m}^{-2}$; F_{Ga} — поток галлия из газовой фазы, $\text{mol} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$; V_{InGaAs} — скорость кристаллизации, $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$; x — мольная доля InAs в InGaAs; $\rho(x)$ — плотность ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$), а $M(x)$ — молярная масса ($\text{kg} \cdot \text{mol}^{-1}$) твердого раствора состава $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

В этом случае скорость кристаллизации твердого раствора InGaAs определяется соотношением

$$V_{\text{InGaAs}} = F_{\text{Ga}}M(x)/(\rho(x)(1-x)), \quad (2)$$

подкрепляемым экспериментальными данными [19].

Из (1) и (2) следует, что встраивание галлия в эпитаксиальный слой происходит аддитивно независимо от потока индия, а его количество ($\text{mol} \cdot \text{m}^{-2}$) в квазижидком слое не меняется и равно постоянной величине

$$N_{\text{Ga}} = x_{\text{In}}^0 (h^0 \rho_l(x_{\text{In}}^0, x_{\text{Ga}}^0)/M_l(x_{\text{In}}^0, x_{\text{Ga}}^0)). \quad (3)$$

Здесь значения плотности ρ_l и молярной массы M_l квазижидкости в приграничном слое принимались равными значениям для раствора-расплава соответствующего состава, h^0 — начальная толщина приграничного квазижидкого слоя, а x_{In}^0 и x_{Ga}^0 — атомные доли индия и галлия в квазижидком слое в момент времени $t = 0$. Они находятся из уравнений термодинамического равновесия по известной температуре T и отношению

$$x_{\text{In}}^0/x_{\text{Ga}}^0 = F_{\text{In}}/F_{\text{Ga}}. \quad (4)$$

Наконец, изменение количества атомов индия в приграничном квазижидком слое можно рассчитать по уравнению

$$dN_{\text{In}}/dt = F_{\text{In}} - V_{\text{InGaAs}}x\rho(x)/M(x), \quad (5)$$

в котором x — мольная доля InAs в GaInAs — находится из решения системы уравнений, описывающих гетеро-

Термодинамические данные, использованные при расчете [21]

Наименование	Значение	Размерность
Энтропии плавления InAs и GaAs		
ΔS_{InAs}	60.75	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
ΔS_{GaAs}	69.67	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
Температуры плавления InAs и GaAs		
T_{InAs}	1511	К
T_{GaAs}	1215	К
Энергии взаимодействия в жидкой фазе, $\alpha_{ij} = \alpha - \beta T$		
$\alpha_{\text{In-Ga}}$	4438 - 0T	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$
$\alpha_{\text{In-As}}$	16161 - 41.87T	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$
$\alpha_{\text{Ga-As}}$	21604 - 38.35T	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$
Энергии взаимодействия в твердой фазе InAs-GaAs		
$\alpha_{\text{InAs-GaAs}}$	12560.4	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$

генные равновесия [20]:

$$\begin{cases} RT \ln x + \alpha_{\text{InAs-GaAs}}(1-x)^2 = RT \ln(4\gamma_{\text{In}}x_{\text{In}}\gamma_{\text{As}}x_{\text{As}}) \\ \quad + \Delta S_{\text{InAs}}(T_{\text{InAs}} - T) - 0.5\alpha_{\text{In-As}}, \\ RT \ln(1-x) + \alpha_{\text{InAs-GaAs}}x^2 = RT \ln(4\gamma_{\text{Ga}}x_{\text{Ga}}\gamma_{\text{As}}x_{\text{As}}) \\ \quad + \Delta S_{\text{GaAs}}(T_{\text{GaAs}} - T) - 0.5\alpha_{\text{Ga-As}} \end{cases} \quad (6)$$

по задаваемой температуре T и рассчитываемому в процессе решения отношению

$$x_{\text{In}}/x_{\text{Ga}} = N_{\text{In}}/N_{\text{Ga}}. \quad (7)$$

Здесь ΔS_{AB} и T_{AB} — энтропия и температура плавления соединений ($AB = \text{InAs}, \text{GaAs}$); $\alpha_{\text{InAs-GaAs}}$ и α_{i-j} — энергии взаимодействия соответствующих компонентов ($i, j = \text{In}, \text{Ga}, \text{As}$) в твердой и жидкой фазах соответственно, а γ_i — коэффициенты активности этих компонентов [21].

Зависимости плотностей и молярных масс для жидкой и твердой фаз рассчитывались в линейном приближении по правилу Вегарда. При расчете равновесных составов использовали термодинамические данные, приведенные в таблице.

Необходимо отметить, что при расчете равновесий значения энергий взаимодействия компонентов для квазижидкого слоя были приняты равными соответствующим значениям, используемым для реального раствора-расплава. Хотя в этих двух случаях абсолютные значения указанных величин должны различаться, их отношения для различных пар компонентов можно принять сохраняющимися: они отражают характер взаимодействия компонентов в трехкомпонентной системе и не вносят принципиальных погрешностей в результаты расчета.

Связь потоков F_{In} и F_{Ga} с реальными потоками индия и галлия в проточном реакторе осуществляли на основе экспериментальной зависимости

$$F_{\text{In}}/F_{\text{Ga}} = K F_{\text{In}(\text{CH}_3)_3}/F_{\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3}, \quad (8)$$

где потоки триметилиндия и триэтилгаллия имеют размерность $\text{mol} \cdot \text{s}^{-1}$, а коэффициент пропорциональности $K = 1.1$.

Таким образом, единственным подгоночным параметром модели является начальная толщина приграничного квазижидкого слоя h^0 .

Результаты расчетов и их обсуждение

Расчеты осуществлялись в два последовательных этапа. На первом задавалась температура и решалась система уравнений гетерогенных равновесий (6). В результате была получена функциональная зависимость

$$x = f\left(\frac{x_{\text{In}}}{x_{\text{Ga}}}\right). \quad (9)$$

При этом имелось два решения для разных областей концентрационного треугольника системы In-Ga-As: одно для области, обогащенной индием и галлием, другое — обогащенной мышьяком. Для их дискриминации провели вычислительный эксперимент, результаты которого приведены на рис. 2.

Из рис. 2 видно, что зависимость состава твердого раствора InGaAs от соотношения индия и галлия в равновесной жидкой фазе для двух рассмотренных случаев одинакова по характеру, но существенно различается по наклону. Указанное различие приводит к тому, что приближение формы расчетных профилей к экспериментальным на рис. 3, *a* достигается при значении $h^0 = 0.03 \text{ nm}$, не имеющем физического смысла. Кроме того, температурная зависимость вхождения индия в эпитаксиальный слой в этом случае обратна наблюдаемой на практике. Таким образом, по двум критериям (толщине квазижидкого слоя и температурной зависимости степени вхождения индия) однозначно можно отдать предпочтение второму варианту (рис. 3, *b*).

На рис. 3 и 4 представлены результаты моделирования концентрационных профилей индия в гетероструктуре InGaAs/GaAs при разных отношениях входных потоков $F_{\text{Ga}}/F_{\text{In}}$ и разной толщине h^0 квазижидкого слоя. Отношение концентраций индия и галлия в твердой

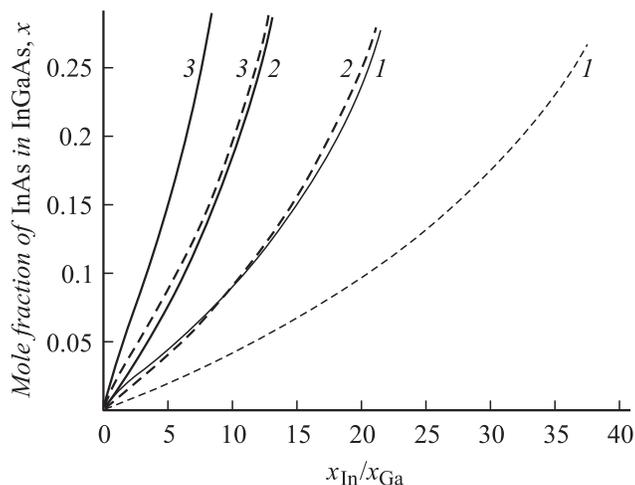


Рис. 2. Зависимости $x = f(x_{\text{In}}/x_{\text{Ga}})$, рассчитанные по уравнениям (6), при 1 — 600, 2 — 700, 3 — 800°C (сплошные и штриховые линии — решения для областей концентрационного треугольника In–Ga–As, обогащенных компонентами A_3 и B_5 соответственно).

фазе на участке „плато“, характеризующемся наступлением равновесия между приходящим из газовой фазы и уходящим в твердую фазу потоком атомов индия, определяется, согласно материальному балансу, отношением концентраций этих элементов в газовой фазе. Как видно из рис. 4, при уменьшении соотношения $F_{\text{Ga}}/F_{\text{In}}$ и принятия $h^0 = 1.2 \text{ nm}$ достигается стационарный состав $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$, соответствующий условию материального баланса

$$\frac{x}{1-x} = \frac{F_{\text{In}}}{F_{\text{Ga}}} \quad (10)$$

или $x = 1/(1 + F_{\text{Ga}}/F_{\text{In}})$. Большая крутизна переднего фронта концентрационного профиля индия при уменьшении отношения $F_{\text{Ga}}/F_{\text{In}}$ в газовой фазе объясняется более быстрым насыщением квазижидкого слоя атомами индия. Видно также, что с увеличением указанного соотношения индий в квазижидком слое за время роста квантовой ямы не успевает накопиться до концентрации, соответствующей выходу на стационарный состав равновесной твердой фазы $x = 0.1$ (кривая 4). При увеличении температуры эпитаксии (рис. 4, *b*) происходит изменение наклона концентрационных профилей индия в соответствии с характером гетерогенных равновесий в системе In–Ga–As. Представленные на рис. 5 расчетные профили иллюстрируют характер сегрегации индия в квантовой яме при различных значениях задаваемого подгоночного параметра h^0 . Наиболее близкие к экспериментальным [22] профили получаются при значениях h^0 в пределах 0.8–1.2 nm (кривые 2 и 3). Это разумно согласуется с возможной толщиной слоя газовой фазы, удерживаемой силами физической адсорбции, принимаемой нами за квазижидкость.

Согласно полученным расчетным зависимостям, при понижении температур процесса эпитаксии наблюдается увеличение крутизны переднего и заднего фронтов

концентрационного профиля индия в гетероструктуре (рис. 3, *b*). Это хорошо согласуется с имеющимися экспериментальными данными [12].

С увеличением толщины квазижидкого слоя наблюдается уменьшение крутизны переднего и заднего фронтов концентрационного профиля индия в твердой фазе, что закономерно объясняется большим временем, необходимым для насыщения и обеднения слоя квазижидкости большим объемом атомами индия до одной и той же концентрации.

В случае роста гетероструктуры с двумя квантовыми ямами квазижидкий приграничный слой не успевает истощиться за время роста барьерного слоя (поток индия из газовой фазы на этом этапе отсутствует), и к моменту начала роста второй квантовой ямы квазижидкий слой будет содержать больше атомов индия, чем при росте первой ямы. Расчетная картина концентрацион-

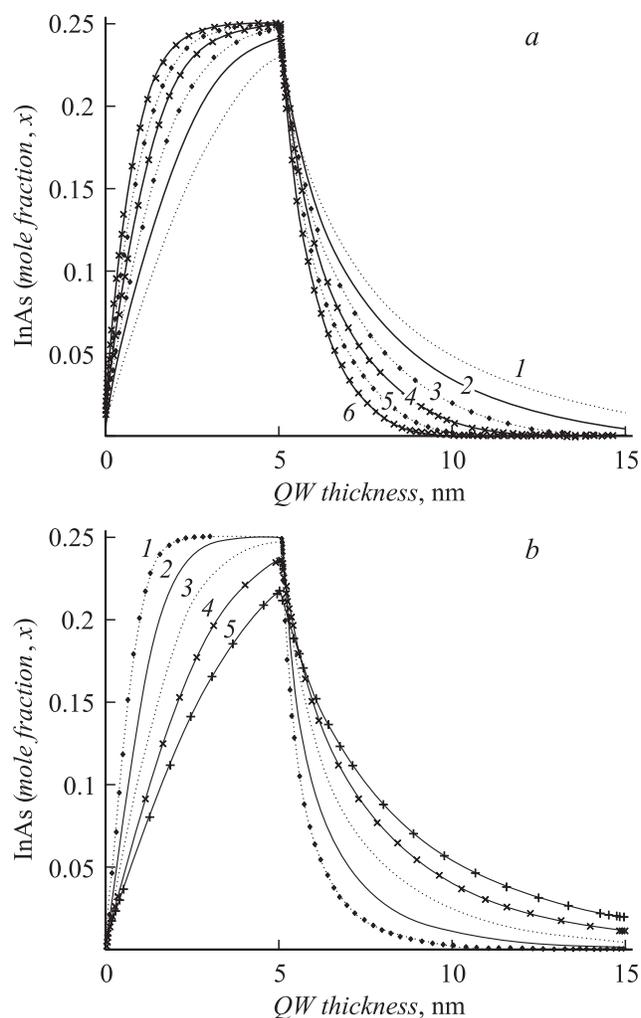


Рис. 3. Расчетный концентрационный профиль индия в гетероструктуре InGaAs/GaAs с одной квантовой ямой шириной 5 nm и барьером шириной 10 nm при соотношении входных потоков $F_{\text{Ga}}/F_{\text{In}} = 3$ и температуре эпитаксии: 1 — 650, 2 — 700, 3 — 750, 4 — 800, 5 — 850, 6 — 900°C; *a* — $h^0 = 0.03 \text{ nm}$, квазижидкий слой обогащен компонентами A_3 ; *b* — $h^0 = 1.2 \text{ nm}$, квазижидкий слой обогащен As.

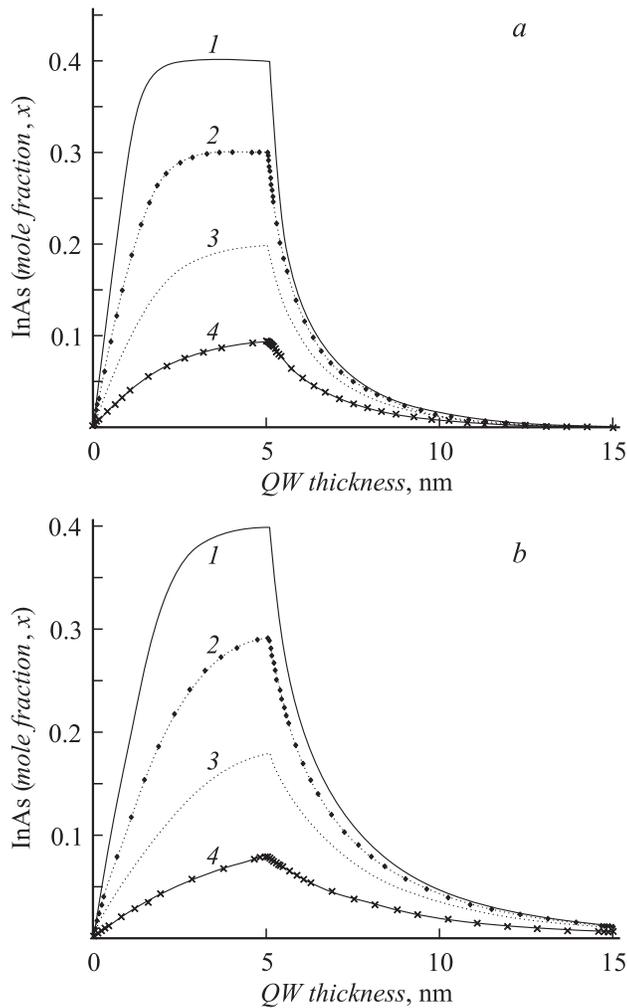


Рис. 4. Концентрационный профиль индия в гетероструктуре InGaAs/GaAs с одной квантовой ямой шириной 5 нм и барьером шириной 10 нм при температурах эпитаксии 720 (а) и 800°С (b) и различных отношениях входных потоков $F_{\text{Ga}}/F_{\text{In}}$: 1 — 1.5, 2 — 7/3, 3 — 4, 4 — 9.

ных профилей индия с несколькими квантовыми ямами представлена на рис. 6. Можно отметить, что при выходе на стационарный состав $x = 0.25$ (кривые 2–4) возможно незначительное различие в составах смежных ям, которое более отчетливо проявляется с повышением температуры эпитаксии (кривая 4). Концентрация индия в последующих квантовых ямах несколько возрастает, что может объясняться неполным истощением индия в квазижидком слое на этапе роста барьерного слоя GaAs. Следует, однако, отметить, что в данной модели не учитывалась десорбция индия из квазижидкого слоя, которая при температуре выше 750–800°С может нивелировать эффект накопления индия, приводящий к указанному различию составов смежных квантовых ям. Следует отметить, что температурный интервал применимости разработанной расчетной модели без дополнительных поправок ограничивается, видимо, наиболее часто используемыми температурами МОСГЭ, лежащи-

ми в пределах 600–750°С. При температуре ниже 600°С следует вводить поправки на неполное разложение исходных газовых источников, а при превышении верхнего значения — на испарение индия из квазижидкого слоя.

Наиболее вероятной причиной различия состава смежных квантовых ям, наблюдаемого в эксперименте, может быть отмеченное выше влияние упругих напряжений, возникающих вследствие несоответствия параметров кристаллической решетки сопрягаемых элементов квантоворазмерной гетероструктуры. Вариант методики количественной оценки такого влияния был приведен в [23].

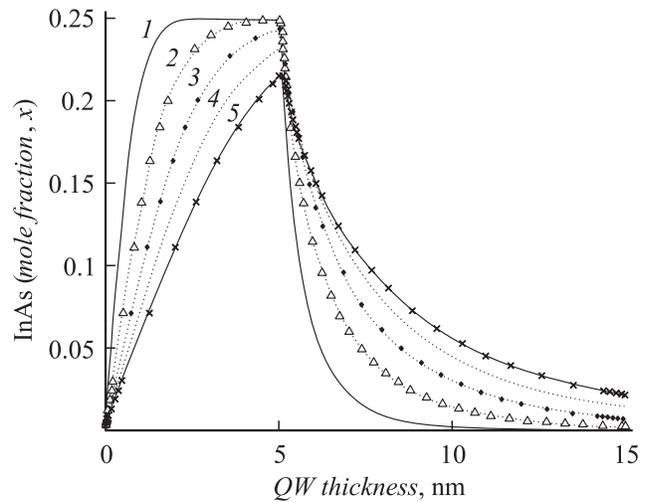


Рис. 5. Концентрационный профиль индия в гетероструктуре InGaAs/GaAs с одной квантовой ямой шириной 5 нм и барьером шириной 10 нм при температуре эпитаксии 770°С и значениях h^0 : 1 — 0.4, 2 — 0.8, 3 — 1.2, 4 — 1.6, 5 — 2 нм.

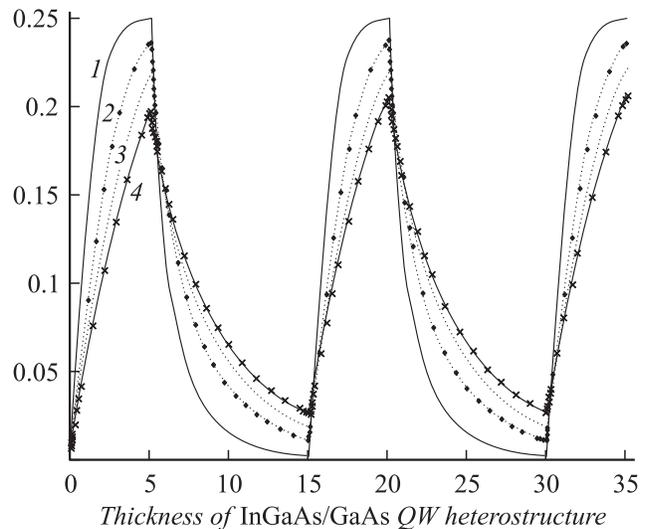


Рис. 6. Концентрационный профиль индия в гетероструктуре InGaAs/GaAs с тремя квантовыми ямами шириной 5 нм и барьерами шириной 10 нм при температурах эпитаксии: 1 — 770, 2 — 800, 3 — 850, 4 — 900°С ($h^0 = 1.2$ нм).

Заключение

С учетом специфики условий формирования низкоразмерных полупроводниковых гетероструктур на основе соединений A_3B_5 методом МОС-гидридной эпитаксии и свойств элементов 3 и 5 групп Периодической системы обоснована возможность представления приграничного слоя газовой фазы в виде „квазжидкости“. Предложено применять для количественных расчетов состава и концентрационных профилей компонентов в эпитаксиальных структурах подходы, используемые при изотермической жидкофазной эпитаксии (в варианте подпитки из газовой фазы), с совместным решением уравнений, описывающих гетерогенные равновесия, и уравнений материального баланса в приграничной к фронту кристаллизации области.

Разработанная модель позволяет для наиболее часто используемого на практике температурного интервала МОСГЭ (600–750°C) прогнозировать характер изменения сегрегационных эффектов с изменением параметров эпитаксиального процесса, используя в качестве единственного подгоночного параметра толщину квазжидкого слоя.

Результаты моделирования концентрационных профилей индия, полученные с использованием этой модели, хорошо согласуются с особенностями экспериментальных профилей индия в квантоворазмерных гетероструктурах InGaAs/GaAs, полученных при различных температурах и соотношениях исходных компонентов в газовой фазе. Они показывают возможность использования предложенной модели в качестве инструмента для целенаправленного поиска условий МОС-гидридной эпитаксии низкоразмерных гетероструктур с требуемыми концентрационными профилями.

Вместе с тем следует отметить, что для более точного описания концентрационных профилей компонентов при более высоких температурах эпитаксии разработанную модель следует дополнить с учетом десорбции In из квазжидкого слоя. Дополнительным фактором, требующим учета (особенно в гетероструктурах с множественными квантовыми ямами), является влияние на сегрегационные явления упругих напряжений, которые возникают вследствие рассогласования параметров кристаллической решетки сопрягаемых элементов гетероструктуры.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ № 04-02-16650).

Список литературы

- [1] *Stringfellow G.B.* Organometallic Vapor Phase Epitaxy: Theory and Practice. London: Academic Press, 1999. 572 p.
- [2] *Акчурун Р.Х.* // Изв. вузов. Материалы электронной техники. 1999. № 2. С. 4–12.
- [3] *Bugge F., Zeimer U., Gramlich S.* et al. // J. Cryst. Growth. 2000. Vol. 221. N 1–4. P. 496–502.

- [4] *Дроздов Ю.Н., Байдусь Н.В., Звонков Б.Н.* и др. // ФТП. 2003. Т. 37. Вып. 2. С. 203–208.
- [5] *Орлов Л.К., Ивина Н.Л.* // ФТП. 2002. Т. 36. Вып. 2. С. 199–204.
- [6] *Jamaquchi K., Okada T., Hiwataishi F.* // Appl. Surf. Sci. 1997. Vol. 117–118. P. 700–704.
- [7] *Potin V., Hahn E., Rozenauer A.* et al. // J. Cryst. Growth. 2004. Vol. 262. N 1–4. P. 145–150.
- [8] *Pitts O.J., Watkins S.P., Wang C.X.* et al. // J. Cryst. Growth. 2003. Vol. 254. P. 28–34.
- [9] *Dussaigne A., Damilano B., Grandjean N.* // J. Cryst. Growth. 2003. Vol. 251. P. 471–475.
- [10] *Zheng Y.J., Lam A.M., Eugstram J.R.* // Appl. Phys. Lett. 1999. Vol. 75. N 6. P. 817–819.
- [11] *Grenet G., Bergigniet E., Gendry M.* et al. // Surf. Sci. 1996. Vol. 352–354. P. 734–739.
- [12] *Mesrine M., Massies J., Deparis C.* et al. // J. Cryst. Growth. 1997. Vol. 175–176. P. 1242–1246.
- [13] *Muraki K., Fukatsu S., Shiraki Y.* // Appl. Phys. Lett. 1992. Vol. 61. N 5. P. 557–559.
- [14] *Dehaese O., Wallert X., Mallot F.* // Appl. Phys. Lett. 1995. Vol. 66. N 1. P. 52–55.
- [15] *Karpov S.Yu., Talalaev R.A., Evstratov I.Yu., Makarov Yu.N.* // Phys. Stat. Solidi (a). 2002. Vol. 192. P. 417.
- [16] *Акчурун Р.Х.* // Изв. вузов. Материалы электронной техники. 2004. № 3. С. 48–51.
- [17] *Yoshida M., Watanabe H., Uesugi F.J.* // Electrochem. Soc. 1985. Vol. 132. P. 677–679.
- [18] *Lee P.W., Omstead T.R., McKenna D.R., Jensen K.F.* // J. Cryst. Growth. 1987. Vol. 85. P. 165–174.
- [19] *Мармалюк А.А.* // Изв. вузов. Материалы электронной техники. 2005. № 1. С. 17–23.
- [20] *Кузнецов В.В., Москвин П.П., Сорокин В.С.* Неравновесные явления при жидкостной гетероэпитаксии полупроводниковых твердых растворов. М.: Металлургия, 1991. 176 с.
- [21] *Паниш М.Б., Илегемс М.* Материалы для оптоэлектроники. М.: Мир, 1976. 405 с.
- [22] *Marmalyuk A.A., Govorkov O.I., Petrovsky A.V.* et al. // J. Cryst. Growth. 2002. Vol. 237–239. Pt. 1. P. 264–268.
- [23] *Akchurin R.Kh., Andreev A.Y., Govorkov O.I.* et al. // Appl. Surf. Sci. 2002. Vol. 188. P. 209–213.