

УДК 536.331

Анализ механизмов перегрева гетероструктур Ge/Si, PbTe/Si в процессе молекулярно-лучевой эпитаксии*

А.В. КАЦОБА, А.А. ВЕЛИЧКО, В.А. ИЛЮШИН, Г.Ф. СИВЫХ

Показано, что при молекулярно-лучевой эпитаксии пленок Ge или PbTe на подложке Si с ростом толщины пленки происходит дополнительное поглощение теплового излучения и как следствие – неконтролируемое увеличение температуры гетероструктуры по сравнению с исходной температурой подложки. Сделан количественный расчет перегрева гетероструктуры, который показал, что для гетероструктуры Ge/Si по мере увеличения температуры нагревателя от 1000 К до 1500 К перегрев возрастает от 50 К до 110 К, для гетероструктуры PbTe/Si от 100 К при $T_n = 890$ К до 150 К при $T_n = 950$ К. Причем наиболее резкое неконтролируемое изменение температуры образца происходит на начальной стадии зарождения и роста, что может резко поменять механизм зародышеобразования, и в конечном счете, повлиять на качество структуры. Наличие такого расчета позволит корректировать температуру подложки в процессе роста для получения качественных эпитаксиальных пленок.

Ключевые слова: молекулярно-лучевая эпитаксия, перегрев, гетероструктура, расчет температуры.

ВВЕДЕНИЕ

В установках молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) используется система радиационного нагрева подложек. Она состоит из резистивного нагревателя имеющего параметры близкие к абсолютно черному телу (АЧТ), температура которого определяется подводимой мощностью. Нагрев осуществляется за счет поглощения подложкой теплового излучения нагревателя, а количество поглощенной подложкой энергии и ее температура определяются спектральной зависимостью коэффициента поглощения подложки. Температура нагревателя подложки определяется с помощью термопары, но так как для получения однородной эпитаксиальной пленки в процессе роста подложка вращается, то установить термопару, имеющую тепловой контакт с подложкой невозможно [1]. Следует отметить, что коэффициент поглощения, и следовательно, температура подложки зависит от многих характеристик материала: ширины запрещенной зоны, концентрации свободных носителей заряда, решеточного спектра поглощения, спектральной зависимости коэффициентов отражения и т. д. Поэтому даже в рамках использования одного материала подложки, например кремния, ее температура будет существенно зависеть от концентрации легирующей примеси. При выращивании эпитаксиальных слоев полупроводников, имеющих ширину запрещенной зоны, меньшую, чем у кремния, в них будет происходить дополнительное поглощение теплового излучения в более длинноволновой области спектра. К таким гетероструктурам можно отнести следующие: Ge/Si, InAs/GaAs, PbTe/Si, CdHdTe/CdTe и другие.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Ранее нами было замечено, что при росте эпитаксиальных пленок InSb на GaAs температура гетероструктуры резко возрастает по мере увеличения толщины эпитаксиальной пленки InSb, хотя температура нагревателя оставалась постоянной. Возрастание температуры фиксировалось по изменению поверхностной сверхструктуры от стабилизации сурьмой, к стабилизации индием из-за реиспарения сурьмы при неизменной интенсивности потоков Sb и In. Для того, чтобы вернуться к первоначальной поверхностной сверхструктуре, приходилось снижать температуру нагревателя на 30–50 °С в зависимости от толщины эпитаксиального слоя InSb. С ростом толщины слоя InSb перегрев структуры возрастал.

* Статья получена 27 марта 2013 г.

В гетеросистемах Ge/Si, PbTe/Si сверхструктурные перестройки не происходят и изменение температуры нельзя отследить. Поскольку рост в режиме неконтролируемого повышения температуры приводит к ухудшению качества структуры, температуру подложки необходимо время от времени корректировать.

Целью данной работы является расчет зависимости температуры гетероструктуры Ge/Si и PbTe/Si от толщины эпитаксиального слоя для различных температур нагревателя подложки.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Причина дополнительного нагрева может быть объяснена следующим образом. На рис. 1 схематически показана зависимость спектральной плотности излучения нагревателя $r_{\lambda T}$ (закон Планка) и область поглощения кремния (вертикальная штриховка) в коротковолновой области от 0 до ~1 мкм. При МЛЭ пленки Ge на Si возникает дополнительное поглощение тепловой энергии пленкой Ge, в спектральной области от 1 до 2 мкм, так как ширина его запрещенной зоны почти вдвое меньше, чем у Si. Это поглощение увеличивается с ростом толщины эпитаксиальной пленки Ge [3]. Такое же явление будет происходить при эпитаксии пленки PbTe, так как ширина его запрещенной зоны 0.32 эВ. Так же при эпитаксии твердого раствора PbSnTe необходимо учитывать уменьшение ширины запрещенной зоны при увеличении концентрации олова [4].



Рис. 1. Спектральная плотность излучения АЧТ (нагревателя подложки) при $T = 1273$ К (схематично)

Важно отметить, что возрастание температуры подложки приводит к увеличению собственной концентрации носителей заряда. Поэтому с ростом температуры возникает дополнительное поглощение на свободных носителях. Такое же явление увеличения концентрации свободных носителей имеет место и в пленках Ge и PbTe, но в значительно большей степени, поскольку ширина их запрещенной зоны много меньше. Это должно приводить к еще большему поглощению и нагреву.

3. МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Для расчета температурного перегрева в различных гетероструктурах были сделаны следующие предположения. Конструкция нагревателя такова, что его можно рассматривать как абсолютно черное тело (АЧТ) излучающего в одном направлении. Схема нагрева подложки нагревателем представлена на рис. 2. Сплошными стрелками показана энергия, поступающая от нагревателя, пунктирными энергия излучаемая подложкой.

Мощность энергии, испускаемой нагревателем, можно записать используя закон Стефана-Больцмана:

$$I = S \varepsilon \sigma T_H^4, \quad (1)$$

где I – количество энергии на единицу площади; S – площадь поверхности нагревателя; T_H – радиационная температура нагревателя ε – степень черноты нагревателя.

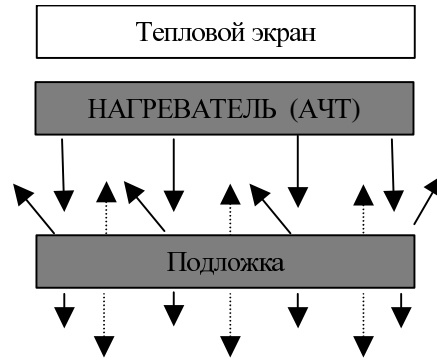


Рис. 2. Схема нагрева подложки нагревателем в установках МЛЭ

Образец можно рассматривать как серое тело (СТ) в том случае, если будет учтена не поглотившаяся часть энергии от нагревателя, соответственно, вся тепловая энергия от нагревателя будет идти на нагрев образца, часть пройдет насквозь и часть отразится от поверхности образца, поэтому закон Стефана–Больцмана для системы образец–нагреватель запишется следующим образом:

$$I_H = S\sigma(1 - R_0)T_H^4 + S(I_1 + I_2), \quad (2)$$

где I_H – энергия от нагревателя; R_0 – коэффициент отражения от тыльной поверхности образца; I_1, I_2 – часть тепловой энергии излучения нагревателя, которая не поглотилась подложкой и вышла из образца с лицевой и тыльной стороны, соответственно.

Вследствие нагрева образца, он также излучает энергию в двух направлениях, отсюда следует, что стационарного уравнения теплового баланса, учитывающего поступление лучистой энергии от нагревателя и собственное излучение образца можно записать в виде

$$S(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)\sigma T_H^4 = S(1 - R_0)\sigma T_H^4 - S(I_1 + I_2). \quad (3)$$

В левой части уравнения (3) стоит величина излучаемой гетероструктурой энергии с обеих поверхностей. В правой части $S R_0 \sigma T_H^4$ – это энергия поглощенная подложкой; $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ – степень черноты тыльной и лицевой поверхности образца соответственно.

Из уравнения (3) следует, что искомая температура подложки находится по формуле

$$T_S^4 = \sqrt[4]{\frac{S(1 - R_0)\sigma T_H^4 - S(I_1 + I_2)}{S\sigma(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)}}. \quad (4)$$

Анализируя уравнения (4) видно, что для нахождения температуры образца необходимо знать количество непоглощенной энергии, которая складывается из отраженного I_1 и прошедшего I_2 потока излучения.

Так как для полупроводников коэффициент поглощения и отражения зависит от длины волны, то необходимо рассматривать спектральные составляющие коэффициентов отражения и поглощения, а также знать плотность энергии излучения в диапазоне длин волн от λ до $\lambda + d\lambda$, которую можно получить из уравнения Планка. Поверхностная плотность спектрального потока, излучаемого абсолютно черным телом в диапазоне длин волн от λ до $\lambda + d\lambda$, равна

$$I_\lambda d\lambda = \frac{8\pi c^2 h}{\lambda^5} \frac{1}{e^{ch/\lambda kT} - 1} d\lambda, \quad (5)$$

где $I_\lambda d\lambda$ представляет собой поток излучения с единицы площади. Проинтегрировав выражение (5) в диапазоне длин волн от λ до $\lambda + d\lambda$ получим количество энергии, приходящееся на

этот диапазон. Так как при прохождении излучения через толстый образец интенсивность излучения падает по экспоненциальному закону, то значения интенсивностей излучения I_1 и I_2 рассчитывались с использованием закона Бугера, учитывающего селективный характер поглощения излучения с помощью коэффициента поглощения $\alpha = \alpha(\lambda)$. Используя закон Бугера можно определить количество не поглощенной энергии.

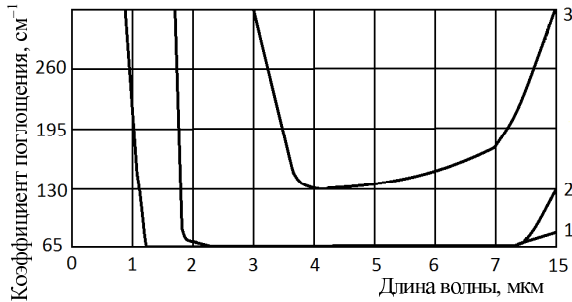


Рис. 3. Зависимость коэффициента поглощения Ge (1), Si(2) и PbTe (3) от длины волны λ [5]

Поскольку точный учет всех механизмов отражения и поглощения сделать невозможно, в расчетах использовались экспериментальные данные, из литературы [5]. Спектральные зависимости коэффициентов поглощения представлены на рис. 3. Кривая (1) соответствует зависимости $\alpha(\lambda)$ для Ge; кривая (2) — для Si; кривая (3) — для PbTe. Как видно из рис. 3 помимо дополнительного поглощения эпитаксиальных пленок в области от 1 мкм, необходимо также учесть поглощение на свободных носителях в дальней инфра-

красной области. Для расчета весь диапазон разбивался на десять участков. На каждом участке брался средний коэффициент поглощения. После нахождения количество непоглощенной энергии на каждом участке результаты суммировались и находилась температура подложки.

На рис. 4 приведены схемы для двух вариантов расчета: без учета отражения излучения от границ образца рис. 4, а и с учетом однократного отражения от каждой из границ рис. 4, б. Поскольку коэффициент отражения излучения R_1 , падающего на поверхность Si слабо зависит от длины волны, то его значение было принято постоянным $R_0 = 0,285$. Для пленки Ge, коэффициент отражения от тыльной границы образца брался в расчетах равным $R_1 = 0,31$, для пленки теллурида свинца PbTe — $R_1 = 0,46$ тогда как отражение от внутренней границы между слоями образца крайне слабое $R_2 = 0,001$.

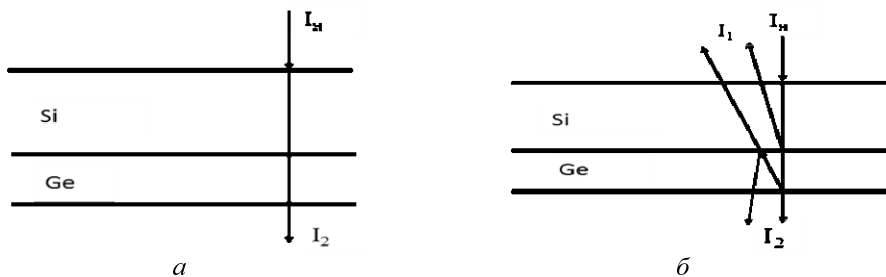


Рис. 4. Схема распределения интенсивности прошедшего и отраженного излучения в гетероструктуре:

а — однократное отражение только от тыльной поверхности подложки; б — учет отражения от трех поверхностей

4. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА

Результаты численного расчета температуры гетероструктуры PbTe/Si в зависимости от температуры нагревателя T_H и толщины пленки приведены на рис. 5. Результаты расчета для Ge/Si показаны на рис. 6. Расчет проводился для следующих температур нагревателя: 890 К и 950 К для гетероструктуры PbTe/Si, 1000 К, 1250 К, 1500 К для Ge/Si. Поскольку образец на-

ходится в вакууме на специальных теплоизолирующих держателях, то потери тепла за счет теплопроводности через держатели пренебрежимо малы и не учитывались. Следует отметить, что расчетные температуры выбирались таким образом, чтобы температура образца соответствовала основным ростовым режимам для пленок Ge и PbTe.

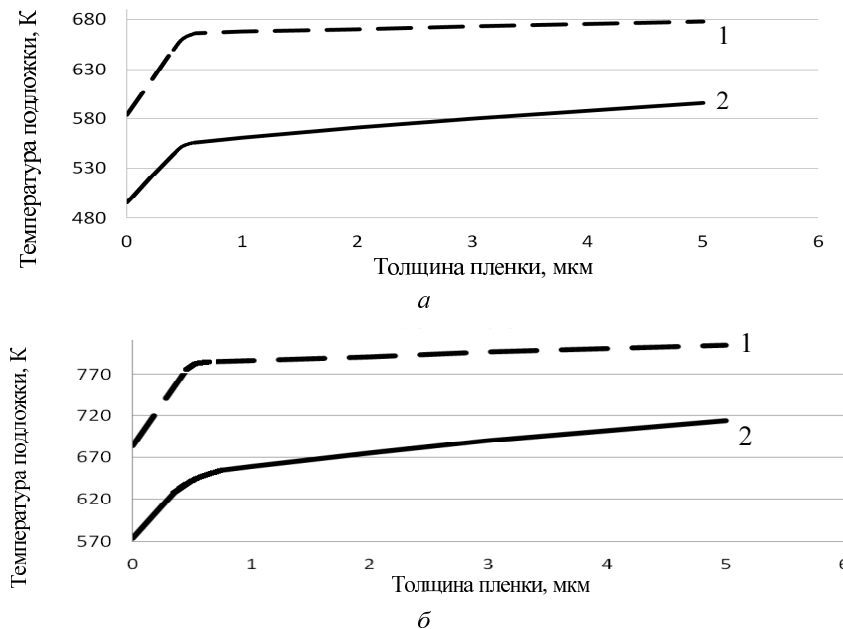


Рис. 5. Зависимость температуры гетероструктуры от толщины пленки PbTe:

а – для температуры нагревателя $T_H = 890$ К, б – для температуры нагревателя $T_H = 950$ К.

Без учета отражения кривая (1) и при однократном отражении кривая (2)

Как и следовало ожидать, учет отражения падающего излучения от границ образца (кривая 2) приводит к уменьшению расчетной температуры образца, поскольку в этом случае учитывается дополнительная потеря энергии за счет отраженных лучей. Также при учете однократного отражения увеличивается ΔT – разница между начальной температурой и конечной, в связи с тем, что отраженные лучи, проходя через толстый образец, отдают тепловую энергию, вследствие чего происходит дополнительное повышение температуры. Результаты расчета показывают, что в процессе МЛЭ пленки PbTe на подложке Si, происходит дополнительное повышение температуры образца, причем увеличение составляет от 100 К при $T_H = 890$ К до 150 К при $T_H = 950$ К.

Из рис. 5 видно, что наиболее резкое изменение температуры происходит на начальной стадии роста до толщины пленки менее 1 мкм, при дальнейшем росте температура увеличивается более плавно. Это происходит из-за того, что при толщинах PbTe более 1 мкм происходит практически полное поглощение излучения в диапазоне длин волн 1–3,9 мкм. При увеличении температуры нагревателя происходит увеличение собственной концентрации носителей, прежде всего в теллуриде свинца, в значительно большей степени, чем в кремнии, из-за чего происходит дополнительное поглощение энергии и повышение температуры гетероструктуры. Важно отметить, что уменьшение ширины запрещенной зоны гетероструктуры PbSnTe при добавлении олова приводит к увеличению концентрации свободных носителей, что приводит к сдвигу поглощения в область длинных волн и как следствие еще большему перегреву гетероструктуры.

Результаты расчета для Ge/Si представлены на рис. 6. Из рисунка видно, что увеличение температуры при эпитаксии пленки германия на кремниевой подложке составляет: от 50 К при $T_H = 1000$ К до 110 К при $T_H = 1500$ К.

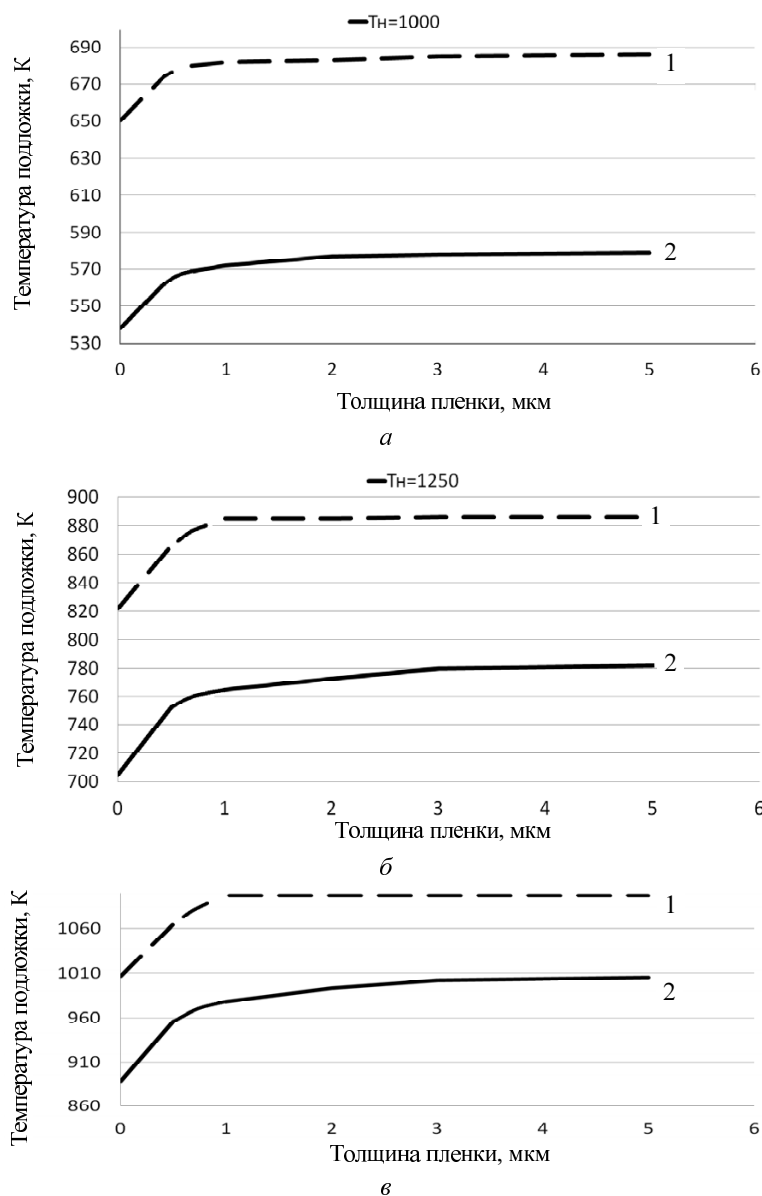


Рис. 6. Зависимость температуры гетероструктуры Si/Ge от толщины пленки Ge:

a – для температуры нагревателя $T_n = 1000$ К; *б* – для температуры нагревателя $T_n = 1250$ К; *в* – для температуры нагревателя $T_n = 1500$ К. Без учета отражения кривая (1) и при однократном отражении кривая (2)

В отличие от пленки теллурида свинца, где увеличение температуры происходило вплоть до толщины пленки 5 мкм, т. е. в течение всего эпитаксиального процесса, при эпитаксии германия температура резко увеличивается только до толщины пленки 1 мкм, дальнейшее увеличение не существенно. Это связано с тем, что при толщине пленки 1 мкм и более пленка германия полностью поглощает дополнительное излучение от 1 до 2 мкм, которое пропускает кремниевая подложка. Так как в диапазоне от 2 до 15 мкм (рис. 3) коэффициент поглощения германия и кремния практически одинаков дальнейшее увеличение температуры не происходит. В диапазоне от 15 мкм коэффициенты поглощения Si и Ge отличаются, но вклад энергии уже не значителен. Вследствие этого температура образца при толщине пленки более 1 мкм практически остается неизменной.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основании приведенных расчетов можно сделать вывод, что при молекулярно-лучевой эпитаксии пленок Ge и PbTe на подложке Si с ростом толщины пленки происходит увеличение температуры гетероструктуры по сравнению с исходной температурой Si подложки. По мере увеличения температуры нагревателя от 1000 К до 1500 К этот перегрев возрастает от 50 К до 110 К для гетероструктуры Ge/Si и от 100 К при $T_H = 890$ К до 150 К при $T_H = 950$ К для гетероструктуры PbTe/Si.

Как видно из результатов расчета, показанных на рис. 5 и 6., наиболее резкое неконтролируемое изменение температуры эпитаксии происходит на начальной стадии зарождения и роста, что может резко поменять механизм зародышеобразования, и в конечном счете, повлиять на качество структуры. Также из рис. 5 видно, что при эпитаксии пленки PbTe температура повышается в течение всего процесса роста, поэтому ее постоянно надо корректировать.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] **Величко А.А.** Оценка разогрева / Современные техника и технологии / А.А. Величко, А.В. Кацюба // Сб. науч. тр. – Т. 3. – Томск, 2011. – С. 409–410.
 [2] **Величко А.А.** Электрофизические свойства / А.А. Величко, В.А. Илюшин // Электронная промышленность. – 1993. – № 8. – С. 48–50.
 [3] **Кацюба А.В.** Анализ температурной нестабильности / Радиоэлектроника и молодежь в XXI веке / А.В. Кацюба // Материалы XVI международного молодежного форума. – Т. 1. – Харьков, 2012. – С. 11–12.
 [4] **Равич Ю.И.** Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца PbTe, PbSe, Pbs / Ю.И. Равич, Б.А. Ефимова, И.А. Смирнов. – Изд-во «Наука» Главн. Ред. Физ.-матем. Лит., 1968.
 [5] **Воронкова Е.М. и др.** Оптические материалы для инфракрасной техники / Е.М. Воронкова и др. – М.: Наука, 1965. – С. 207–217.

REFERENCES

- [1] Velichko A.A., Kacjuba A.V. Ocenka razogreva / Sovremennye tehnika i tehnologii/ Sb. nauch. tr. – Tomsk. 2011 tom 3. – S. 409–410/
 [2] Velichko A.A., Iljushin V.A. Jelektrofizicheskie svojstva // Jelektronnaja promyshlennost. – 1993, № 8, S. 48–50.
 [3] Kacjuba A.V. Analiz temperaturnoj nestabil'nosti / Radiojelektronika i molodezh' v XXI veke / Materialy XVI mezhdunarodnogo molodezhnogo foruma. – Har'kov, 2012. – tom 1. – S. 11–12.
 [4] Ravich Ju.I., Efimova B.A., Smirnov I.A. Metody issledovanija poluprovodnikov v primenenii k hal'kogenidam svinca PbTe, PbSe, Pbs. Izdatel'stvo «Nauka» Glavn. Red. Fiz.-matem. Lit., 1968.
 [5] Voronkova E.M. i dr. Opticheskie materialy dlja infrakrasnoj tehniki. – M.: Nauka, 1965. – 207–217 s.

Величко Александр Андреевич, доктор технических наук, профессор. Основные направления научных исследований – разработка матричных интегральных ФПУ на основе структур «полупроводник на диэлектрике» и исследование начальной стадии зарождения и роста гетероструктур. Имеет более 90 научных публикаций, более 10 учебных пособия, 20 авторских свидетельств. E-mail: vel6049@mail.ru

Сивых Геннадий Федорович, кандидат физико-математических наук, доцент. Основные направления научных исследований – механика жидкости и газа, теплофизика. Имеет более 80 публикаций. E-mail: genfes@ngs.ru

Илюшин Владимир Александрович, кандидат технических наук, доцент. Основные направления научных исследований – молекулярно-лучевая эпитаксия гетероструктур. Имеет более 30 научных публикаций, 3 учебных пособия, 8 авторских свидетельств. E-mail: ilval@ngs.ru

Кацюба Алексей Владимирович, аспирант. Основное направление научных исследований – молекулярно-лучевая эпитаксия структур Ge-Si на подложках Si и (Ba,Ca)F₂/Si(100). E-mail: kacuba@ngs.ru

A.V. Katsyuba A.A. Velichko, V.A. Ilyushin, G.F. Sivyh

Analysis of the mechanisms of overheating Ge / Si heterostructures during molecular beam epitaxy

During molecular beam epitaxy of Ge or PbTe films on Si substrate with increasing thickness of the film an additional absorption of thermal radiation is happen and as a result, uncontrolled heterostructure's temperature increase compared to the original temperature of the wafer is took place. The quantitative calculation of heterostructure's is carried out. It is demonstrated that with increasing temperature of the heater from 1000 K to 1500 K, the overheating increases from 50 K to 110 K for the Ge/Si heterostructure and from 100 K at $T_H = 890$ K to 150 K at $T_H = 950$ K for the PbTe/Si heterostructure. Moreover, the most sharp uncontrolled change of sample's temperature occurs at the initial stage of nucleation and growth. That can dramatically change the mechanism of nucleation and affect to the quality of the structure. The presence of such calculation will allow correcting the wafer temperature during the growth of epitaxial films.

Key words: molecular beam epitaxy, overheating, heterostructure, the calculation of the temperature, germanium, silicon, plumbum telluride, absorption spectrum.