

УДК 539.23:537.31

**ФІЗИКО-ТЕХНОЛОГІЧНІ АСПЕКТИ МОДЕЛЮВАННЯ
НИЗЬКОТЕМПЕРАТУРНОЇ ЕПІТАКСІЇ ШАРУВАТИХ
СТРУКТУР КРЕМНІЮ ТА ГАЛІЮ АРСЕНІДУ****С. П. Новосядлий, А. І. Терлецький, О. Б. Фрик**

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника;
76000, м. Івано-Франківськ, вул. Шевченка, 57;
тел. +380(342)59-60-07, e-mail: andrii.terletskyi@pu.if.ua*

Розглянуто питання технології вирощування епітаксійних шарів монокремнію та галію арсеніду, які використовують для створення компонентів великих інтегральних мікросхем. Досліджено процеси низькотемпературної епітаксії та їхні моделі при формуванні субмікронних структур ВІС як на моно-Si так і на GaAs. Така технологія дозволяє формувати структури GaAs на Si-підкладках.

***Ключові слова:** епітаксія, монокремній, галію арсенід, дефектоутворення невідповідності, гетероструктури, надгратки.*

Вступ. Напівпровідникові епітаксійні структури широко використовують у сучасній мікроелектроніці. Можливості отримання тонких і надтонких одношарових та багатошарових структур різної геометрії та топології з широкою варіацією складу й електрофізичних властивостей за товщиною та поверхнею нарощуваного шару зумовлюють інтенсивне впровадження епітаксійних методів вирощування в мікроелектроніку та інтегральну оптику, в технологію формування суб- і наномікронних структур великих і швидкодіючих інтегральних схем, а також різного роду оптоелектронних приладів. У зв'язку з цим якість вирощених епітаксійних композицій повинна задовольняти досить високим вимогам. Якщо вимоги щодо чистоти епішарів зазвичай вдається задовольнити порівняно легко завдяки доволі низьким робочим температурам кристалізації, то на шляху створення досконалих за структурою епітаксійних композицій постає ряд принципових труднощів. Наприклад труднощі, пов'язані з отриманням надтонких шарів, властивості яких різко змінюються на межі розділу або в межах кожного шару. В цій роботі розкрито закономірності росту епішарів, їхні властивості та технології формування структур на їх основі.

Основні закономірності дефектоутворення під час формування епітаксійних структур Si і GaAs [1, 6]. Найбільш суттєвими джерелами дефектів у епітаксійних структурах є напруження, які виникають у процесі кристалізації епішару або наступного його охолодження. До основних причин виникнення напружень належать: 1) різні періоди граток матеріалів (підкладки епішарів), які викликають появу напру-

жень невідповідності $\sigma_{\Delta\alpha}$; 2) різниця коефіцієнтів термічного розширення цих матеріалів $\Delta\alpha$ або нерівномірний розподіл температури за товщиною чи поверхнею епішару, що є джерелом термічних напружень в епітаксійній композиції; 3) наявність градієнта складу за товщиною епітаксійного шару; 4) підвищення концентрації дефектів на межі розділу шарів.

Такі напруження залежно від величини пластичності матеріалу епітаксійної структури, товщини шарів і теплових умов росту можуть частково релаксувати з утворенням різного роду дислокацій, а залишкові напруження можуть викликати пружну деформацію епітаксійної структури, наприклад зміщення захованого n^+ -шару в кремнієвих епітаксійних структурах (КЕС), які використовують для формування біполярних ВІС.

Напруження невідповідності визначаються невідповідністю періодів ґраток:

$$\sigma_{\Delta\alpha} = \frac{E}{1-\nu} \cdot \frac{\Delta a}{a}, \quad (1)$$

де E – модуль пружності, ν – коефіцієнт Пуассона, $\Delta a = a_n - a_{uu}$ – різниця періодів ґратки підкладки і епішару, \bar{a} – середнє значення періоду ґратки цих двох матеріалів.

Термічні напруження, зумовлені різницею коефіцієнтів термічного розширення підкладки і епішару, виникають у процесі охолодження епітаксійної структури від температури епіросту або у процесі її нагрівання та охолодження під час наступних термообробок. Їхня величина і знак визначається різницею періодів ґратки підкладки та плівки за температур вирощування та вимірювання:

$$\sigma_{\Delta\alpha} = \frac{E}{1-\nu} \cdot \left(\frac{a_n^T - a_n^{T_0}}{\bar{a}_n} - \frac{a_{uu}^T - a_{uu}^{T_0}}{\bar{a}_{uu}} \right), \quad (2)$$

де a_n^T , a_{uu}^T – періоди ґраток підкладки і епішару за температури вирощування, $a_n^{T_0}$, $a_{uu}^{T_0}$ – ті ж періоди за температури вимірювання; \bar{a}_n , \bar{a}_{uu} – середні значення періодів ґраток підкладки та епішару для заданого інтервалу температур.

Вираз (2) можна використовувати для розрахунку максимальних пружних властивостей на межі розділу, якщо в епітаксійній структурі не відбувається пластичної деформації. У випадку лінійної температурної залежності періодів ґратки цей вираз збігається з відомим виразом для розрахунку термічних напружень:

$$\sigma_{\Delta\alpha} = \frac{E}{1-\nu} \cdot \Delta\alpha \cdot \Delta T, \quad (3)$$

де $\Delta\alpha$ – різниця значень температурних коефіцієнтів розширення підкладки та епішару в досліджуваному інтервалі температур ΔT .

Найчастіше $\sigma_{\Delta\alpha}$ проявляється у вигляді залишкових пружних напружень, які викликають не тільки прогин (деформацію) структури, але можуть призводити і до відшарування епішару від підкладки. Величину діючих напружень можна визначити шляхом вимірювання радіуса кривизни прогину.

Якщо величини напружень, які виникають в епісистемі, будуть перевищувати величину критичного напруження утворення дислокацій у матеріалі за певної температури, то в останньому може відбутися пластична деформація і генерування дислокацій. Таким чином, основну роль в епіструктурах відіграють напруження невідповідності та термічні напруження (в тому числі градієнтні), зумовлені різницею температурних коефіцієнтів розширення. У більшості випадків, особливо в умовах гетероепітаксії, значення напружень невідповідності є завжди більше значення термічних напружень (як мінімум на порядок). Тому напруження невідповідності є основним джерелом дислокацій невідповідності в епіструктурах.

Основними механізмами генерування дислокацій невідповідності в реальних умовах епіросту є ковзання дислокацій чи розширення дислокаційних петель. На рис. 1 подано схему утворення дислокацій невідповідності.

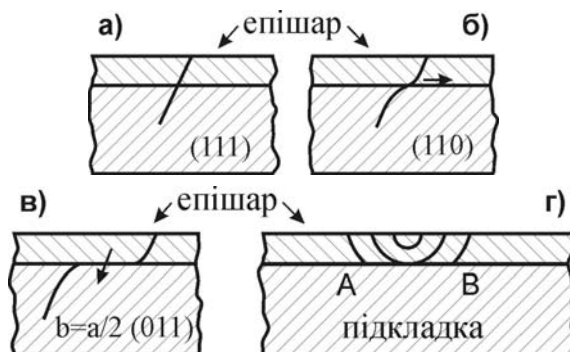


Рис. 1. Основні механізми дислокацій невідповідності: а, б, в) за рахунок прогину дислокацій, які проростають із підкладки; г) за рахунок розширення дислокаційних петель

Критична товщина епіплівки, через яку проростає дислокація невідповідності, визначається із балансу сил, що діють на дислокацію: сила лінійного натягу дислокації і сили натягу в ступені основи дислокації (сила Пайерлса):

$$h_{kp} = \frac{wb(1-\nu_u \cos^2 \theta)(\ln(h_{kp}/b)+1) + \tau_0 b \sin \theta}{Fbf \cos \omega - \nu_0 / \cos \varphi}, \quad (4)$$

де $w = \frac{M_u M_n b}{\pi(M_u + M_n)(1-\nu_u)}$, $F = \frac{2M_u}{1-\gamma_u}$, M_u , M_n – модулі зсуву епішару та

підкладки, $\nu_{ш}$ – коефіцієнт Пуассона шару, b – вектор Бюргерса дислокації; f – невідповідність, θ – кут між лінією дислокації невідповідності та вектором Бюргерса; τ_0 – поверхневий натяг плівки; γ_0 – енергія дефекту пакування; ω – кут між напрямом ковзання та нормаллю до площини ковзання і площини границі розділу; φ – кут між поверхнею шару та площиною ковзання.

Такий механізм утворення дислокацій невідповідності відкриває цікаві можливості підвищення структурної досконалості плівок (бездислокаційних). Механізм утворення дислокації шляхом розширення дислокаційних петель, що зароджуються на поверхні епіплівки, подібний до поширення хвилі, як показано на рис. 1, б.

Тому для зниження густини дислокацій необхідно: 1) зменшувати товщину суцільного шару епітаксії h_0 або підвищувати швидкість епіросту; 2) оптимізувати вектор орієнтації підкладки, що призводить до збільшення $h_{кр}$; 3) нарощувати проміжні градієнтні шари, що зменшують h_0 і збільшують $h_{кр}$. Як правило, такі дислокації розміщуються на межі розділу епішар-підкладка і також сприяють зміцненню захованого шару.

Одним із основних джерел власних точкових дефектів у епіструктурах є монокристалічна підкладка. Зростанню цих дефектів сприяє висока температура епітаксійного процесу. Для їх зниження доцільно знижувати температуру епітаксії.

На величину перехідного шару впливає явище автолегування, причинами якого є: 1) твердофазна дифузія домішок із підкладки в епішар; 2) перенесення домішок зі зворотної сторони підкладки в епішар у процесі росту через газову фазу з робочої сторони підкладки; 3) перенесення домішок в епішар через газову фазу на робочу сторону. Для зменшення автолегування процеси вирощування проводять за умов пониженого тиску в робочому реакторі.

У випадку твердофазної епітаксії в проточних газових системах установок типу УНЕС-2ПКА із одночасним завантаженням у реактор великої кількості підкладок (> 10) доволі великої площі (діаметром підкладок > 150 мм) можливі неоднорідності розподілу легуючої домішки вздовж поверхні епітаксійного шару, а також коливання вмісту домішки в шарах, які вирощені на різних поверхнях графітового п'єдесталу. Основною причиною таких неоднорідностей є збіднення газової суміші відповідної домішки у зв'язку з інтенсивним переходом її у вирощуваний шар. Для усунення такого явища використовують різні варіанти рівномірного подавання парогазової суміші одночасно до всіх підкладок, профілювання температурного поля в межах п'єдесталу-підкладкотримача, а також керування швидкістю газового потоку в реакторі та контролювання відстані між п'єдесталом-тримачем і стінкою реактора. Розглянемо особливості процесу локальної епітаксії шарів монокремнію, що є досить актуальним на сьогоднішній час і для GaAs.

Фізико-технологічні особливості процесу локальної епітаксії моно-Si у субмікронній технології ВІС [1, 2]. Локальні процеси в технології формування структур ВІС дозволяють якісно її змінити – перейти до 3-вимірних структур. Відомо, що планарна технологія ВІС насамперед зобов'язана процесу фотолітографії, який дозволяє локально видаляти або зберігати маскуючу плівку резиста. Не менш важливий етап у розвитку суб- і нанотехнологій – процес локального оксидування кремнію і розроблений на його основі процес комбінованої ізоляції – ізопланар. Можливості локальних процесів у сучасній технології швидкісних ВІС є досить широкими, це стосується також і процесу локального епітаксійного нарощування монокремнію, над яким тривалий час працювали автори. На тепер можна чітко сформулювати основні вимоги до реалізації локальної епітаксії Si:

– ріст монокремнію повинен здійснюватись у місцях, вільних від маски, при цьому на поверхні маски не повинно утворюватись ніяких полікристалічних чи аморфних фаз;

– маскуючі властивості діелектричної плівки та її геометричні розміри не повинні змінюватись у процесі локального епіросту;

– швидкість росту монокремнію в локальних областях не повинна залежати від площі чи геометрії цих областей та співвідношення площ маскуючих і немаскуючих областей;

– такий процес повинен вписуватись у маршрут технологічного процесу формування структур як окремий мікроцикл.

Серед проведених нами досліджень локальної епітаксії кремнію можна виділити такі:

– досягнення квазірівноважних умов за рахунок керування концентрацією кремніймістких компонентів, у тому числі у випадку малих чи великих концентрацій SiCl_4 (рис. 2а, обл. А, В);

– зменшення перенасичення в газовій фазі за рахунок введення у парогазову суміш (ПГС) установки УНЕС-2ПКА на основі $\text{SiCl}_4 + \text{H}_2$ добавки галогеноводню HCl ;

– заміна тетраклориду кремнію SiCl_4 іншими джерелами або їхньою сумішшю, що дозволяє суттєво зменшити температуру процесу епітаксії з 1150°C до 920°C , а саме: SiH_2Cl_2 , SiH_3Cl , $\text{SiH}_4 + \text{HCl}$, $\text{Si}_2\text{H}_6 + \text{HCl}$;

– модернізація установки УНЕС-2ПКА у частині карбонілового п'єдесталу з його карбідізацією під діаметр Si-підкладок > 150 мм та регулювання газового потоку для забезпечення пониженого тиску реактора.

На рис. 2,б подані діаграми ізотерм $\text{Si/Cl} = \psi(\text{Cl/H})$, які характеризують положення робочої точки ПГ-реактора в термодинамічних координатах. Використання SiH_2Cl_2 , SiH_3Cl , і $\text{SiH}_4 + \text{HCl}$ та зниження температури процесу відповідає зміщенню робочої точки на діаграмі на нову ізотерму.

Враховуючи, що гетерогенний процес, яким є епітаксія кремнію, достатньо характеризувати тільки параметрами газової фази, ми ввели в діаграму криві перенасичення, що відповідають складу адсорбованого шару на поверхні. Це дозволяє визначити поверхневе перенасичення як різницю Si/Cl в адсорбованому шарі відносно $Si/Cl = 0,5$.

Така діаграма дозволяє виділити дві технологічні області (А, В), в яких система наближається до рівноважного стану, що забезпечує максимальну вибірковість процесу локальної епітаксії.

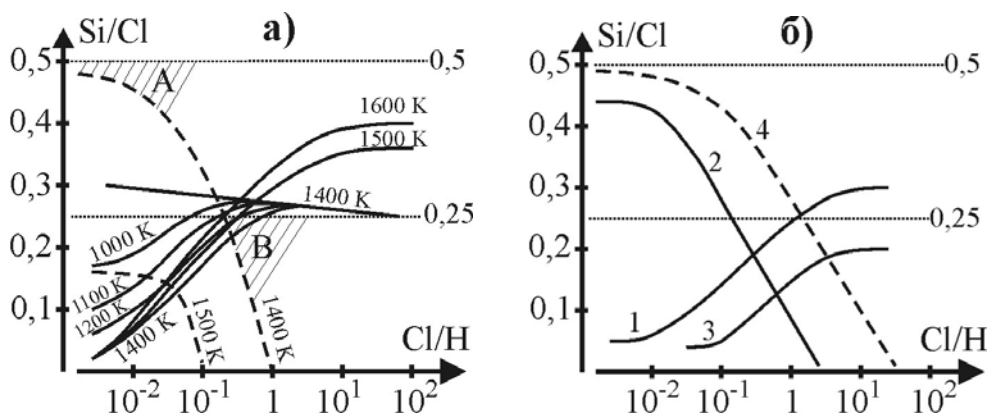


Рис. 2. Діаграми ізотерм $Si/Cl = \psi(Cl/H)$ для газової суміші (суцільна лінія): а) для поверхні (штрихова лінія) б) їх зміна при розбавленні ПГС аргоном (1, 2 – без аргону; 3, 4 – із введенням Ar).

Дамо коротку характеристику технологічних областей. Область А – область малих концентрацій джерела Si в ПГС характеризується високим перенасиченням в газовій фазі та досягненням квазірівноважних умов на поверхні Si – підкладки при 1400 К. У випадку збіднення ПГС від SiH_4 до $SiCl_2$ і до нуля система наближається до рівноважного стану. Область В – область високих концентрацій і характеризується високим перенасиченням кремнію на поверхні Si, такий режим відповідає режиму травлення хлором. У цьому випадку для заданої системи маскування (Si_3N_4) досягаються досить високі швидкості росту 0,2-0,4 мкм/хв (рис. 3) – це відповідає реальному процесу епітаксії.

Проведені дослідження дозволяють зробити такі висновки щодо моделі локальної газофазної епітаксії моно-Si: 1) незалежність перенасичення в газовій фазі і на поверхні Si – підкладки для заданого співвідношення Cl/H досягається за рахунок розбавлення ПГС інертним газом (Ar) або зниженням загального тиску в системі до рівня $10^4 \div 3 \cdot 10^4$ Па, при якому швидкість росту епішару вже не залежить від ступеня маскування. 2) зазначений процес забезпечує відтворюваність за товщиною епішару <5-7% для Si – підкладок 150 мм, що відповідає

проектним нормам ВІС 0,5-1 мкм.; 3) замість ПГС SiH_4+H_2 доцільно перейти на ПГС SiH_4+HCl або $\text{Si}_2\text{H}_6+\text{HCl}$, що дозволяє знизити температуру процесу до 920°C , а це в свою чергу зменшує дефектність, товщину перехідного шару та автолугування мінімум на порядок. Ще менші температури можна отримати, якщо додатково опромінювати епішар ексимерним лазером.

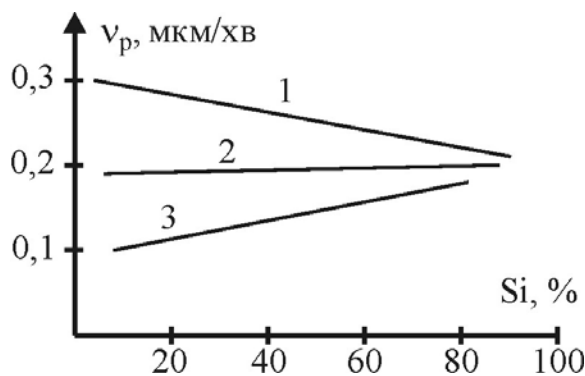


Рис. 3. Залежність швидкості епіросту Si від ступеня маскувння Si-підкладки ($\text{SiCl}_4 - 1,3\%$, $T = 1100^\circ\text{C}$, $Q = 0,9 \text{ м}^3/\text{год}$ для УНЕС-2ПКА)

Розглянутий процес було реалізовано на структурах пам'яті серії K132 об'ємом 64К та 256К.

Гомоепітаксія моно-Si і аморфного гідрогенізованого $\alpha\text{-Si:H}$ в НВЧ-реакторах електронно-циклотронного резонансу (ЕЦР) [1, 5]. Подальше зниження дефектності епішарів кремнію і досконалості кристалічної структури зумовили застосування ВЧ і НВЧ плазмохімічних процесів осадження (13,56 МГц і 2,4 ГГц).

Осаджуючи моно-Si із силану (SiH_4) в НВЧ ЕЦР-реакторах можна очікувати, що властивості таких епіплівків Si будуть аналогічні властивостям плівків, отриманих іонно-променевим осадженням з використанням іонних джерел "Радикал", "Іскра". Це зв'язано з тим, що в НВЧ ЕЦР-реакторах потік іонів до підкладки значно перевищує потік нейтральних часток. Водень, що перебуває в плазмі, сприяє дуже легкому видаленню вуглецю та кисню, які завжди є в моно-Si, вирощеному методом Чохральського. Це означає, що такі епітаксійні структури є більш досконалішими, ніж моно-Si, оскільки в них концентрації домішок кисню і вуглецю можуть бути зведені до нуля.

Така гомоепітаксія кремнію здійснюється за температур $400\div 540^\circ\text{C}$ з використанням моно- чи дисилану. Перед епітаксією Si-підкладки обробляють у плазмі водню, що забезпечує чистоту поверхні на атомарному рівні, оскільки водень повністю відновлює всі окисли, зосереджені на поверхні. Для реалізації такого процесу використовувалась установка GIR-500. Існують два чинники, які дещо обмежують

області застосування цього процесу: недостатньо висока щільність іонів ($\approx 10^{10} \text{ см}^{-3}$), що обмежує швидкість росту на рівні $6,5 \div 8 \text{ нм/хв}$ та необхідність від'ємного зміщення на підкладці, яка сягає $25 \div 35 \text{ В}$. Однак за своїми характеристиками такі епішари відповідають плівкам із парогазової суміші. Якщо щільність плазми підвищити на порядок (цього досягають у реакторах DECR – Distributed Electron Cyclotron Resonance), то швидкість осадження Si може сягати 100 нм/хв .

Нами були проведені експерименти для виявлення можливості формування низькотемпературних ($< 200^\circ\text{C}$) епітаксійних плівок для сонячних елементів (СЕ) як на підкладках n-, так і p-типу. Така низька температура осадження епішарів повністю унеможливило деформації та напруження і дозволяє використовувати підкладки товщиною $\geq 100 \text{ мкм}$. Слід відзначити, що практично неможливо формувати p^+ -епішари на n-Si. Для епітаксійного нарощування n^+ -епішарів використовувались підкладки p-типу 100 і 200 мкм товщиною з опором $0,5$ – $1,0 \text{ Ом}\cdot\text{см}$. Для експериментів використовувався моносилан SiH_4 і фосфін PH_3 , розбавлений у водні до $0,001\%$. Було вибрано такі умови осадження: тиск $0,1 \div 0,64 \text{ мм рт.ст.}$, PH_3/SiH_4 від $0,0001\%$ до 1% , потужність розряду на частоті $13,56 \text{ МГц}$ складала від 55 Вт до 550 Вт . Товщина n^+ -епішарів визначалась часом осадження і складала від 3 нм до 250 нм на початковій і кінцевій фазі. Температура осадження змінювалась від кімнатної до 200°C . Верхні контакти формувалися сплавом АКГо-1-1, а нижні нікелем, осадженими магнетронним і електронно-променевим методами. Площа елемента складала $4 \times 4 \text{ мм}^2$. Особливої уваги заслуговують параметри СЕ (напряга холостого ходу U_{xx} , струм короткого замикання та К.К.Д. сонячного елемента для різних товщин n^+ - епішару.

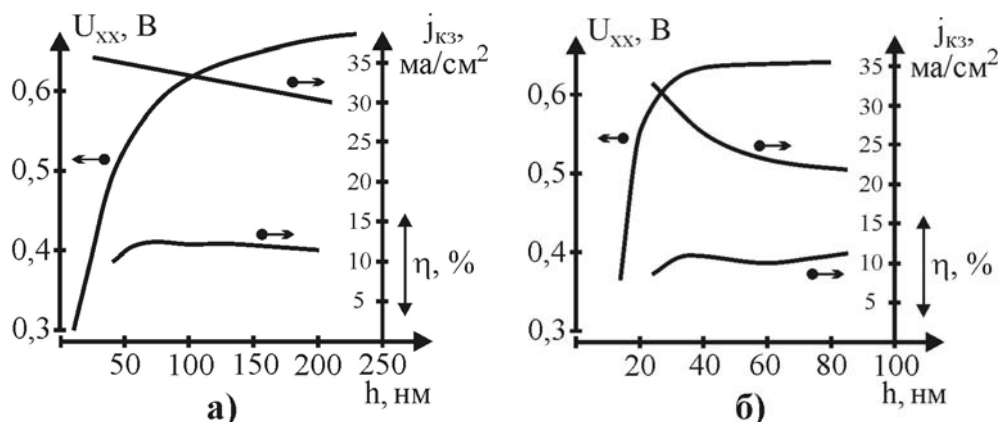


Рис. 4. Параметри СЕ, сформованих гомопереходом n^+ -p на Si-підкладках при різних товщинах n^+ - епішару (а – одноетапне осадження, б – двоетапне осадження)

З рис. 4 видно, що вдалим вибором топології та контактних систем К.К.Д. таких СЕ можна довести до рівня 20-25% і уникнути зміни концентраційних профілів та автолегування епітаксійного шару.

Аналогічним методом можна проводити осадження аморфного гідрогенізованого кремнію (α -Si:H), який також широко використовують для формування елементів оптоелектронних тонкоплівкових фоторезисторів, СЕ та інших фоточутливих приладів. У випадку звичайних методів осадження плівок α -Si:H із парогазової суміші необхідно нагрівання до температури понад 300°C, що є їхнім суттєвим недоліком. НВЧ ЕЦР плазмовий метод дозволяє наносити високоякісні плівки α -Si:H вже за кімнатних температур. Одним із найбільш важливих параметрів методу є тиск робочого газу (SiH_4), який визначає такі властивості плівок як фотопровідність, ширину забороненої зони та ІЧ-поглинання. Плівки, які отримують під тисками $< 5,3 \cdot 10^{-2}$ Па, мають більшу фотопровідність і ширину забороненої зони, ніж плівки, отримані під тисками $> 5,3 \cdot 10^{-2}$ Па. За оптимальних умов такі аморфні плівки мають фотопровідність $6 \cdot 10^{-6}$ Ом·см при густині опромінення 100 мВт/см², а ширина забороненої зони зростає до величин 2,1 еВ.

Технологічні можливості формування епітаксійних досконалих гетероструктур [1, 3, 4, 5]. Гетероепітаксійні структури напівпровідникових матеріалів широко використовують для виготовлення сучасних оптоелектронних і НВЧ-приладів, таких як інжекційні лазери, світлодіоди, СЕ, НВЧ-транзистори тощо. В більшості таких приладів на основі гетеропереходів протяжність активної області приладу є співрозмірна з дифузійною довжиною носіїв заряду. У зв'язку з цим ефективність і надійність таких приладів значною мірою визначається досконалістю їхньої гетероструктури, насамперед наявністю на гетеро-межі та в активній області приладу дефектів, які є центрами розсіювання та безвипромінювальної рекомбінації носіїв заряду. Саме це і визначає важливість досліджень природи дефектів у гетероепітаксійних системах і створення досконалих гетероструктур. Особливо інтенсивно досліджують гетероструктури на основі сполук $A^{III}B^V$, які знайшли широке практичне застосування. Однак суттєва різниця періодів ґратки і температурних коефіцієнтів термічного розширення матеріалів біполярних з'єднань стає джерелом значних напружень невідповідності та термічних напружень у гетерокомпозиціях, які перевищують критичні значення напружень утворення дислокацій та зміни зарядового стану. Тільки для гетерокомпозиції $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ми маємо ситуацію, коли за температури епітаксії спостерігається повна відповідність періодів підкладки та нарощуваного шару потрійного твердого розчину (для $x \leq 0,4$), тобто напруження невідповідності відсутні. Цей факт визначає широке використання зазначеної композиції для формування шаруватих структур, таких як ПТ із селективним легуванням та біполярних транзисторів з варізонним емітером. У інших випадках гетерокомпози-

цій зменшення напружень невідповідності можна досягнути шляхом зниження температури епітаксії ($<400^{\circ}\text{C}$).

Застосування низькотемпературних методів епітаксії вирішує не тільки проблему створення різних гетеромереж, але і забезпечує значне покращення структурної досконалості гетерокомпозицій. З пониженням температури росту суттєво зменшуються критичні напруження утворення дислокацій. Це призводить до того, що імовірність релаксації напружень невідповідності з утворенням дислокацій невідповідності різко зменшується. Одночасно понижуються величини термічних напружень і концентрація власних точкових дефектів в епішарах, а міжфазна межа стає різкою.

Слід відзначити, що прогрес у розвитку низькотемпературних методів молекулярно-променевої епітаксії та епітаксії із застосуванням металорганічних сполук дозволив останнім часом отримати достатньо високоякісні гетероструктури ряду сполук $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ безпосередньо на Si-підкладках: GaAs/Si, GaAlAs/Si, GaP/Si, чим відкрито нові перспективні напрямки розвитку мікро- і наноелектроніки. У цьому напрямі є також і наші дослідження, на яких ми зупинимось нижче.

Останнім часом значна увага також приділяють гетероепітаксійним структурам кремнію на ізолюючих підкладках у зв'язку з можливістю виготовлення на такій основі структур ВІС з високою швидкістю і радіаційною стійкістю одночасно зі зниженням споживаної потужності. Тут найбільш придатними підкладками є сапфір (Al_2O_3) та шпінель (MgO , Al_2O_3). Гетероепітаксійні кремнієві структури отримують двома методами: кристалізацією із газової фази за участю хімічних реакцій та вакуумним осадженням. Незважаючи на великі переваги вакуумного осадження, що зумовлено високою стерильністю процесу в умовах глибокого вакууму і низьких температур кристалізації ($<700^{\circ}\text{C}$), у промисловому виробництві широко використовують перший метод, як найбільш відпрацьований. Процес епітаксійного нарощування зазвичай проводять із використанням вертикального бочкоподібного п'єдесталу-тримача підкладок під час індукційного нагріву. Робочим середовищем є суміш силану (дисилану) з воднем. Розклад силану і кристалізацію епіплівок проводять за температур 900–950 $^{\circ}\text{C}$.

Великі значення невідповідності періодів ґратки та різниці температурних коефіцієнтів лінійного розширення контактних матеріалів зумовлюють високу дефектність гетероепітаксійних шарів, які є причиною зниження часу життя і рухомості носіїв заряду. В цьому випадку для підвищення структурної досконалості та характеристик гетероепітаксійних Si-структур використовується розроблений нами технологічний процес.

На першій стадії на сапфірову підкладку методом кристалізації з газової фази наносять тонкий (<250 нм) кремнієвий епішар. Потім у цей епітаксійний шар за кімнатної температури імплантують іони Si^+ ,

Si^{++} (одно та двозарядні), які створюють захований аморфний шар, а імплантована гетероструктура відпалюється з метою активації процесу твердофазної епітаксії з використанням в ролі затравки тонкого кристалічного шару відпаленого моно-Si біля поверхні підкладки. На другій стадії затравочний кристалічний шар моно-Si видаляється у потоці водню (або хлористого водню), а на залишковий гетероепітаксимальний шар шляхом кристалізації із парової фази нарощується шар моно-Si товщиною 450–950 нм. Такий процес знижує дефектність епішару більш ніж на порядок.

Для усунення невідповідності періодів ґратки та отримання так званих ізоперіодичних гомоепітаксійних структур нами відпрацьовано процеси багатозарядної іонної імплантації. Сутність процесу полягає в тому, що одночасно з основною легуючою сумішшю в підкладку або епішар вводиться друга домішка, яка викликає протилежну за знаком зміну періоду ґратки матриці. Наприклад, якщо основна легуюча домішка збільшує період ґратки, то додаткове багатозарядне легування необхідно здійснити домішкою з тетраедричним ковалентним радіусом меншим, ніж у атомів основного матеріалу, які вона заміщує, і навпаки. Умова ізоперіодного (тобто такого, що не змінює період ґратки) складного легування багатозарядної імплантації записується у вигляді

$$\varepsilon_l c_l + \varepsilon_k c_k = 0, \quad (5)$$

де $\varepsilon_l, \varepsilon_k$ – коефіцієнти деформації (розтягу або стискування) легуючої та компенсуючої домішки, c_l, c_k – їхні концентрації, відповідно.

У ролі компенсуючих зміну періоду ґратки добавок найбільш доцільно використовувати домішки, які не проявляють електричної активності та мають достатньо високу розчинність у такому напівпровідниковому матеріалі. Для моно-Si такими домішками, наприклад, є ізовалентні домішки елементів IV групи (C, Ge, Sn). Германій та олово мають тетраедричні ковалентні радіуси більші, ніж у атомів кремнію, і є дуже добрим компенсуючими добавками для отримання сильнолегованих фосфором і бором епітаксійних шарів. З урахуванням обмеженої розчинності олова в кремнії, у випадку складного легування багатозарядною імплантацією, найбільш доцільною компенсуючою домішкою є германій (одно- чи двозарядний). У випадку легування Sb, який має більший, ніж у Si, тетраедричний радіус, у ролі компенсуючої домішки можна, очевидно, використовувати вуглець, хоча його присутність у моно-Si є небажаною.

Для отримання сильнолегованих епітаксійних шарів $A^{III}B^V$ у ролі компенсуючих домішок доцільно використовувати ізовалентні домішки елементів III і V груп Періодичної системи. Наприклад, для сильного легування галію арсеніду донорними домішками сірки і селену, які мають менші тетраедричні радіуси, ніж у заміщених ними атомів арсену, в ролі компенсуючих домішок слід використовувати ізовалентні домі-

шки індію або сурми. У випадку легування телуром, який має більший тетраедричний радіус, ніж арсен, ефект компенсації буде досягтися введенням (імплантацією) ізовалентних домішок бору або фосфору. Аналогічні дослідження можна провести також для інших сполук і домішок. Крім компенсації невідповідності періодів ґратки, введення ізовалентних домішок може також призводити до суттєвого зміщення матриці, перешкоджаючи утворенню дуг і розмноженню дислокацій. Це також позитивно впливає на досконалість відповідності структури епітаксійних композицій.

До суттєвого зниження щільності дислокацій в епітаксійних структурах призводить зниження робочої температури епіпроцесу, оскільки різко зростає критичне напруження утворення дислокацій. Зниження температури росту призводить до зменшення ефективності автолегування із підкладки та, відповідно, до зменшення товщини перехідних шарів, особливо на межі розділу з підкладкою і підвищення різкості p - n переходів.

На цій основі нами розроблена технологія низькотемпературного епітаксійного процесу вирощування шаруватих структур галію арсеніду на кремнієвих підкладках з гетером великого діаметру, яка реалізується наступним чином.

Формування епітаксійних арсенідгалієвих шарів на монокристалічних кремнієвих підкладках, розорієнтованих на кут 4° , здійснюється після хімічної обробки підкладок в суміші Каро шляхом використання надвисокочастотного збудження плазми з розподіленим електронно-циклотронним резонансом на основі металорганічних сполук на частоті 2,4 ГГц при потужності плазми 300÷700 Вт, яка забезпечує швидкість епіросту 0,1÷0,25 мкм/хв. Перед епітаксійним осадженням шарів GaAs проводиться багаторозрядна імплантація германію (Ge^{++}) в моно-Si підкладки з енергією $E \geq 75$ кеВ та дозою $D \geq 150$ мкКл/см² із наступною активацією домішки при густині фотонного потоку 5÷10 Вт/см². Це так звана умова ізоперіодного легування для вирівнювання постійних ґраток.

Операція компенсування реалізується НВЧ-плазмовим ростом плівки германію товщиною 10-100 нм у НВЧ-реакторі ЕЦР із швидкістю росту $>0,1$ нм/с за температур $\leq 200^\circ\text{C}$. Така операція епіросту германію може бути виконана також і в реакторі пониженого тиску за $T=570-650^\circ\text{C}$ піролізом моногерману (GeH_4) зі швидкістю осадження $>0,15$ нм/с з використанням опромінення ексимерним лазером.

Для епітаксійного нарощування шарів широкозонних чи вузькозонних напівпровідників (GaAs, AlGaAs) використовуються газові суміші із металорганічних сполук: триметилгалію $\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$ – TMGa, триетилгалію $\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$ – NTGa, триметилалюмінію $\text{Al}(\text{CH}_3)_3$ – TMAI, арсину AsH_3 .

Технологія формування багатошарових композицій (надграток) [1, 6]. Досягнення в технології формування однорідних за товщиною із заданим розподілом складу та електричних властивостей тонких і надтонких шарів з різкими р-п переходами і гетеромежами методами МОС-гібридної та молекулярно-променевої епітаксії зробили реальним формування багатошарових композицій (шаруватих структур), які мають унікальні властивості та які відкривають нові можливості для створення принципово нових транзисторів. Такого роду епітаксійні композиції з надтонкими шарами (< 2 мкм) можна розглядати як особливий клас матеріалів, фундаментальні властивості яких визначаються характером розподілу, товщинами, складом шарів, тобто можна конструювати зонну структуру матеріалу під необхідний транзистор і керувати в широких межах хвильовими функціями та характером переносу носіїв заряду в ньому.

Розглянемо специфіку їх формування та властивості. Якщо дуже тонкий шар напівпровідникового матеріалу, товщина якого є співрозмірною з довжиною хвилі де-Бройля електронів, розмістити між шарами другого більш широкозонного напівпровідника, то завдяки проявленню квантово-розмірних ефектів енергетичний спектр носіїв заряду в ньому зазнає суттєві зміни і стає подібним до дискретного спектра атомних або молекулярних структур. В утворених у такий спосіб квантових ямах спостерігається квантування енергетичних рівнів електронів і дірок. Така енергетична діаграма двосторонньої гетероепітаксильної комбінації показана на рис. 5.а.

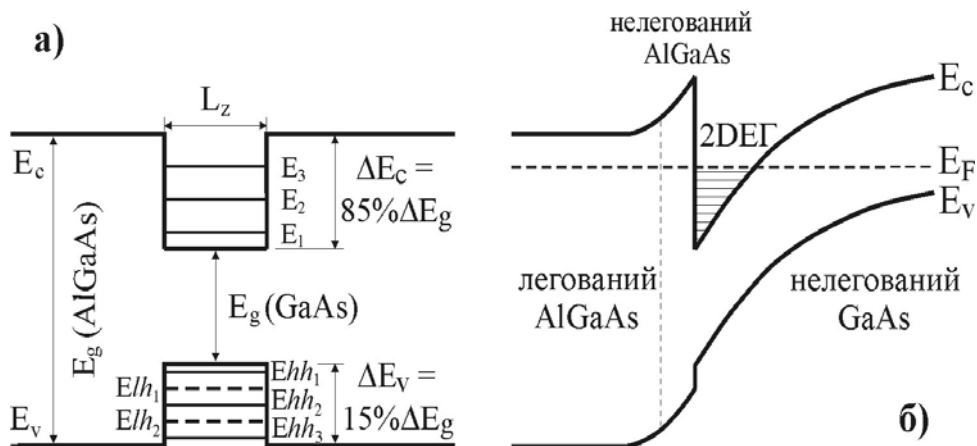


Рис.5. Квантування енергетичних рівнів електронів зони провідності (E_1, E_2, E_3), легких (E_{lh1}, E_{lh2}) і важких ($E_{hh1}, E_{hh2}, E_{hh3}$) дірок валентної зони гетероструктури GaAs/AlGaAs а) та енергетична діаграма зонної структури гетерокомпозиції з двовимірним електронним газом (2DEG) б).

Принциповий інтерес для створення НВЧ-транзисторів і ВІС на їх основі являють ізоперіодні гетероструктури з двовимірним електронним газом (2DEG) (рис. 5, б). Завдяки наявності розриву в зоні провідності та дії кулонівських сил, зумовлених присутністю іонізованої донорної домішки, ці носії на гетеропереході утворюють двовимірну електронну систему, в якій сильно зростає рухомість електронів (на $1\div 2$ порядки), тобто до $2\cdot 10^6$ $\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$. Змінюючи склад і товщину окремих шарів, можна незалежно змінювати період ґратки, ширину забороненої зони і транспортні властивості такої багатошарової системи, яку називають надґраткою.

Завдяки цьому, для мікроелектроніки було запропоновано ряд нових типів транзисторів, які використовують великі значення швидкості та рухомості електронів в GaAs і дуже малі розміри структур, що суттєво підвищує ступінь інтеграції та швидкодію ВІС. До таких приладів належать польові транзистори на гетероструктурах із селективним легуванням (СЛПТ), біполярні гетеротранзистори (БГТ) із широкозонним емітером, транзистори з проникливою базою, вертикальні балістичні транзистори, транзистори з планарно-легованими бар'єрами та транзистори на гарячих електронах, які базуються на ефекті просторового перенесення гарячих електронів в гетероструктурі. Їхні структури показано на рис.6.

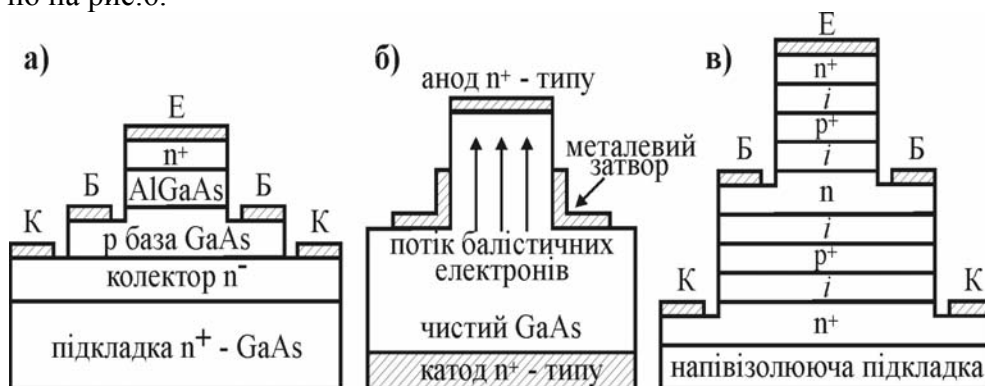


Рис. 6. Структури транзисторів на гетеропереходах: а) біполярний гетеротранзистор; б) вертикальний балістичний транзистор; в) транзистор з планарно-легованим бар'єром.

Наведемо їх коротку технічну характеристику:

1. В СЛПТ електрони рухаються від витоку до стоку в тонкому двовимірному інверсному шарі, який формується на лінії між широкозонним AlGaAs та вузькозонним нелегованим GaAs. Тонкий шар нелегованого AlGaAs відділяє 2D-електрони в GaAs від донорів у легуваному шарі AlGaAs під затвором. Значне зменшення домішкового розсіювання призводить до суттєвого збільшення рухомості, особливо за низької температури гелію, а це зменшує опір каналу та збільшує крутиз-

ну транзистора. Час затримання поширення сигналу на один затвор СЛПТ на сьогоднішній день складає порядку 10 пс і 6 пс для 300 К і 77 К, відповідно, тобто такі прилади є найбільш швидкодіючими із польових транзисторів.

2. У БГТ розрив забороненої зони на межі гетеропереходу створює потенціальний бар'єр для дірок, що переходять із р-GaAs бази в n-AlGaAs емітер. Однак він є більший від бар'єру, який повинні долати електрони переходячи із емітера в базу. В результаті цього суттєво підвищується ефективність емітера за рахунок збільшення інжекції та швидкості електронів, що зумовлює значне зменшення часу пролітання бази з високим коефіцієнтом підсилення. Таким чином маємо по суті супербетатранзистор, який працює на частотах 100 ÷ 200 ГГц.

3. Відмінною особливістю транзисторів з проникливою базою є надтонка металева сітка (база), яка розміщується всередині арсенід-галієвого епітаксійного шару. Метал утворює бар'єр Шотткі з GaAs, вмонтований потенціал якого повністю збіднює GaAs у проміжках між смужками сітки. Достатньо високий позитивний потенціал, який подається на базовий електрод, зменшує ширину збідненого шару, в результаті чого між емітером і колектором виникають провідні канали. Гранична частота таких транзисторів сильно залежить від розмірів комірок металевої сітки і для розміру комірки в 50 нм дозволяє досягти частоти 150÷200 ГГц (нагадує вакуумний триод).

4. Вертикальні балістичні транзистори, як і транзистори з проникливою базою мають вертикальну структуру. Поле бар'єру Шотткі затворного електроду можна змінювати провідність каналу. Затвор розміщено на поверхні структури, що спрощує його конструкцію.

5. В транзисторах з планарно-легованими бар'єрами, на межі емітера і колектора створюються потенціальні бар'єри за допомогою тонких p^+ -шарів, які для будь-якого зміщення є повністю збіднені електронами. Таким чином, ці транзистори працюють на основних носіях заряду. Як і у біполярних гетеротранзисторах із широкозонним емітером, електрони інжектуються в базу з великою енергією відносно дна зони провідності, що визначає високу дрейфову швидкість електронів. У таких транзисторах можна досягти граничну частоту вже на рівні 200÷250 ГГц.

6. Основний принцип транзистора, що працює на основі гарячих електронів, відповідає вакуумному діоду, де катод представляє канал між витоком і стоком, інжектуючи гарячі електрони, які збираються іншим напівпровідниковим шаром (анодом). На цьому принципі створено три типи приладів: транзистор із інжекцією заряду, польовий транзистор із від'ємним опором (зі спадаючою ВАХ) і програмований запам'ятовувачий пристрій з довільною вибіркою на гарячих носіях.

З усіх цих варіантів транзисторів найчастіше застосовують СЛПТ. Розглянуті процеси та їх моделі дозволяють зробити ряд висновків:

Висновки.

1. Проведено аналіз закономірностей дефектоутворення в процесі формування епітаксійних структур для суб- і наномікронних ВІС.

2. Досліджено технологічні процеси нарощування епішарів моно-Si та GaAs, визначено основні чинники, відповідальні за дефектоутворення.

3. Встановлено, що для мінімізації дефектоутворення в епітаксійних шарах Si та GaAs слід зменшувати температуру епітаксійного росту, зокрема осадження епішарів необхідно проводити за допомогою хімічно активних частинок в НВЧ-плазмі електронно-циклотронного резонансу на частоті > 1 ГГц.

4. Для зменшення напружень невідповідності ґраток і отримання ізоперіодичних гомоепітаксійних структур визначено умову ізоперіодичного складного імплантаційного легування.

5. Практично реалізовано умову ізоперіодного легування для епітаксійних структур GaAs на кремнієвих підкладках великого діаметру (>150 мм) з використанням багатозарядної імплантації Ge^{++} .

6. Визначено умови формування шаруватих структур (надґраток) для формування транзисторів високої швидкодії.

Література

1. Новосядлий С.П. Суб- і наномікронна технологія структур ВІС / С.П. Новосядлий. – Івано-Франківськ: Місто НВ, 2010. – 454 с.
2. Новосядлий С.П. Мезепіпланарна технологія – як основа в організації субмікронних суміжних Ві-К-Д-МОН структур ВІС / С.П. Новосядлий, В.М. Бережанський // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. – 2007. – Т.25. – №.1(1). – С. 40-45.
3. Патент України на корисну модель №68203. Спосіб формування епітаксійних арсенід-галієвих шарів на монокристалічних кремнієвих підкладках / С.П. Новосядлий, В.М. Вівчарук, Т.П. Кіндрат. – № u201104229; заявл. 07.04.2011; опубл. 26.03.2012, бюл. №6.
4. Круковский С. И. Солнечные элементы на основе тандемных гетероструктур GaAs/n-GaAs-AlGaAs / С.И. Круковский, Ю.Е. Николаенко // Технологии и конструкции в электронной аппаратуре. – 2003. – №.6. – С. 39-40.
5. Shimokawa, R. Very low temperature epitaxial of Silicon Films for Solar Cells / R. Shimokawa, M. Yamanaka, I. Sakata // Jap. Journal of Applied Physics. – 2007. – Vol.46. – №12. – P. 7612-7618.
6. Мильвидский М. Г. Структурные дефекты в эпитаксиальных слоях полупроводников / М.Г. Мильвидский, В.Б. Освенский. – М.: Металлургия, – 1985. – 144 с.

*Стаття надійшла до редакційної колегії 26.02.2018 р.
Рекомендовано до друку д.т.н., проф. Мойсишиним В.М.,
д.т.н., професором Олійником А.П.*

**PHYSICAL-TECHNOLOGICAL ASPECTS OF SIMULATION
OF SILICON AND GALLIUM ARSENIDE LOW-TEMPERATURE
EPITAXIAL LAYERED STRUCTURES**

S. P. Novosjadly, A. I. Terletskyi, O. B. Fryk

Vasyl Stefanyk Precarpathian National University;

76000, Ivano-Frankivsk, Shevchenko str., 57;

tel. +380 (342) 59-60-07, e-mail: andrii.terletskyi@pu.if.ua

It was considered the questions of the growing technology of mono-silicon and gallium arsenide epitaxial layers, which are used to create components of large integrated circuits. The processes of low-temperature epitaxy and their models in the formation of sub-micron structures of LSI both on mono-Si and on GaAs have been investigated. This technology allows for the formation of GaAs structures on Si-substrates.

Key words: *epitaxy, mono-silicon, gallium arsenide, defect formation of discrepancy, heterostructure, superlattices.*