

Рис. 8. Время релаксации энергии, полученное из параболической (○) и непараболической (●) зонных моделей (— — однородная)

ряда структур, сконструированных из различных полупроводниковых материалов.

Был рассчитан кремниевый МДП-прибор с длиной канала 60 нм. Выяснено, что: а) всплеск скорости при 77 К больше, чем при 300 К; б) мал эффект включения электрон-электронных взаимодействий даже для МДП с длиной канала 250 нм.

Полученные с помощью ЭВМ данные хорошо совпадают с экспериментальными измерениями.

Заключение. Гибридный метод в областях был разработан для практического анализа и проектирования субмикронных полупроводниковых структур. Решение уравнений типа гидродинамических ведет к уменьшению машинных затрат для этого типа анализа, однако значения нескольких физических параметров необходимо определять из отдельного источника. Недавние расчеты показали, что подвижность носителей должна рассматриваться как функция от s/v -плотности потока энергии, деленного на среднюю скорость носителей, а не просто как функция от энергии электронов. Наконец, представлены результаты расчетов, выполненных с помощью полного МК-метода и включающих некоторые явления, часто не учитываемые в традиционном МК-анализе.

Поступила в редакцию 11 ноября 1991 г.

УДК 538.971

М. Джафари Раухани, А. М. Гюи, М. Лярусс, Д. Эстев

(Тулуза, Франция)

ОБЗОР ТЕОРИЙ ФОРМИРОВАНИЯ ДЕФЕКТОВ НА ГРАНИЦЕ

Описываются приближение сплошных сред и моделирование в атомном масштабе и сопоставляются их результаты, в частности, в определении критической толщины, при которой образуются граничные дефекты.

Введение. Граничные дефекты, особенно граничные дислокации, изучаются в течение нескольких десятилетий. Интересно, что первые атомные модели дислокаций больше имели отношение к поверхностным, нежели к объемным дислокациям [1, 2]. Далее последовало приращение к несоот-

ветствию монослоев и ориентированному нарастанию [3, 4]. Позже было показано, что граничные дислокации играют важную роль при росте кристаллов, даже при отсутствии несоответствий [5]. Это обусловило обширный анализ экспериментальных данных по скоростям роста в предположении, что граничные дислокации служат источниками центров роста. В настоящее время интерес к граничным дефектам связан с технологиями гетероструктур, квантовых ловушек и сверхрешеток [6—10].

В данной работе после краткой характеристики различных видов компенсации несоответствия мы рассмотрим модель сплошной среды, в частности определение критической толщины. Моделирование в атомном масштабе будет представлено в сравнении с различными моделями роста энергии взаимодействия. Приведен пример для случая CdTe/GaAs с несоответствием 14,6 %.

Типы компенсации несоответствия. При эпитаксиальном росте на подложке с другим параметром решетки в растущем слое в подложке развиваются механические напряжения вследствие растяжения одного и сжатия другого материала. Согласно Ван дер Мерве и Джессеру [11], материалы могут компенсировать эти напряжения следующими способами:

1. Если взаимодействие между атомами в обоих веществах гораздо сильнее, чем между атомами подложки и слоя, энергия напряжения на границе мала, и атомы остаются в положениях несоответствия [12].

2. Если взаимодействие между атомами подложки и слоя сильнее и выращенный слой тонкий, он будет равномерно деформирован, чтобы уменьшить граничную неупорядоченность. Это называется деформационным снятием несоответствия [4, 13].

3. С увеличением толщины слоя энергия напряжения станет достаточной, чтобы деформировать подложку. Хотя осаждаемые атомы и атомы подложки взаимно упорядочены, напряжения приведут к изгибу.

4. В некоторых случаях деформация в слое может быть неоднородной. Появится градиент несоответствия по толщине слоя, приводящий к изменению расстояний между атомами от постоянной решетки в подложке до постоянной решетки в выращиваемом материале [14].

5. При определенной толщине осажденного слоя, называемой критической, граничная энергия напряжений будет столь велика, что появятся протяженные дефекты, такие, как дислокации несоответствия. В этом случае деформация не будет уже однородной в плоскости, параллельной границе, а окажется локализована возле линий дислокаций [2]. Снятие напряжения через дислокации несоответствия может быть более или менее эффективно в зависимости от угла между границей раздела и вектором Бюргерса для дислокации или от винтового характера дислокации [13].

6. В случае малого несоответствия между решетками или большой плотности дислокаций в подложке существующие дислокации могут распространиться в осаждаемый слой. Изгибы этих проникающих дислокаций приводят к частичной компенсации несоответствия.

Приближение сплошной среды для граничных дефектов. В этих моделях осажденный слой рассматривается как сплошная среда и плотность энергии деформации E_e выражается с помощью теории упругости [11, 15, 16]. У разных авторов [2, 13, 17—25] применяются различные выражения для энергии дислокации E_d как функции модуля сдвига. Полное несоответствие f компенсируется частично деформацией и частично дислокациями. Эта вторая составляющая компенсации δ зависит от плотности дислокаций.

Энергетический баланс позволяет делать выбор между этими двумя видами компенсации. Если предположить, что для данной толщины несоответствие компенсируется полностью одним способом, т. е. $\delta = 0$ или $\delta = f$, то переход произойдет при критическом несоответствии f_c , таком, что $E_e(f_c) = E_d(f_c)$ [4, 17].

Более реалистичский критерий заключается в предположении, что производная полной энергии зануляется, т. е. $\partial E / \partial e = 0$ [4, 26]. Решение этого уравнения дает значение деформации в равновесии e . Но это решение не обязательно удовлетворяет физическому условию $e \leq f$. Тогда критическое

несоответствие определяется условием $e = f$. Преимущество второго критерия в том, что он позволяет вводить обратимым путем малые количества дислокаций. Эта модель применялась как для одиночных осаждаемых слоев [16, 17, 21—25], так и для сверхрешеток [26—28], а также для случая проникающих дислокаций с использованием сил на линиях дислокаций [13, 16, 25].

Для обоих приведенных критериев кривую зависимости критического несоответствия от толщины слоя можно легко обратить в зависимость критической толщины от величины несоответствия. Но ни одна из этих моделей не включает физического механизма образования и распространения дислокаций. Поэтому были предложены феноменологические модели динамики дислокаций [16, 19, 29], учитывающие скорости скольжения или размножения дислокаций. Эти модели позволяют описать временную и температурную зависимости релаксации несоответствия через дислокации и применяются для слоев сплава SiGe на Si-подложке [29, 30] и для более сложных гетероструктур [31, 32].

Результаты приближения сплошной среды для гетероструктур SiGe/Si, приведенные на рис. 1, получены Додсоном и Цао [29]. На этом рисунке экспериментальные точки [33] сопоставлены с результатами расчета по равновесным моделям без учета развития дислокаций, полученными Мэтьюзом и др. [16], и результатами Родсона и Цао с учетом размножения дислокаций для 50-нанометровой пленки SiGe/Si на Si. Здесь строится зависимость деформации несоответствия от полного несоответствия, получаемого изменением соотношения SiGe в сплаве. Полное несоответствие увеличивалось до 4%, что соответствует пленке Ge на Si. Помимо лучшего соответствия динамической модели эксперименту, на рис. 1 показано, что переход от когерентного к некогерентному наращиваемому слою происходит не так легко, как предполагается в теории равновесия.

Моделирование в атомном масштабе. Динамические модели, используемые в теории сплошной среды, основаны на феноменологическом рассмотрении и часто используют эмпирические параметры, которые определяются подгонкой результатов к экспериментальным данным. Моделирование в атомном масштабе частично позволяет обойтись без этого. Кроме того, оно позволяет подробно представить механизм образования каждой простой дислокации, который не столь элементарен, как в случае точечного дефекта, например вакансии. Следовательно, для моделирования гетероэпитаксиального роста требуется координатно-зависимая модель энергии взаимодействия в атомном масштабе. Минимизация этой энергии и даст равновесное расположение атомов. В литературе есть две простые модели. Первая — приближение многих тел, где полная энергия представляется в виде суммы парных взаимодействий и суммы взаимодействия трех тел [34, 35], вторая — приближение валентного силового поля, где энергия представлена как сумма растяжения связи и отклонения угла связи [36, 37].

Моделирование показало, что кластеры формируются на подложке с максимальной деформацией на границах кластеров. Благодаря этому межслоевая атомная миграция более предпочтительна, чем внутрислоевая. Первый подход заключается в обобщении моделирования гомоэпитаксиального роста с различными скоростями межслоевой и внутрислоевой миграций. В результате получается трехмерный рост с образованием граничных дефектов при слиянии островков [38, 39]. Второй подход заключается во включении энергии деформации в энергетические барьеры, относящиеся к различным атомным движениям. Последовательность со-

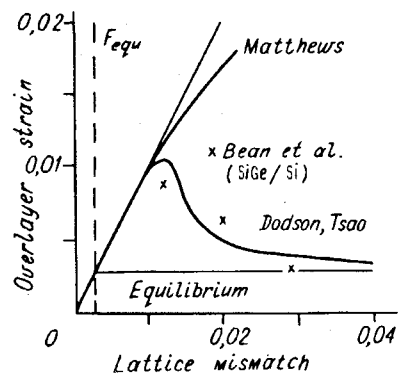


Рис. 1. Релаксация в 50-нанометровом слое SiGe на Si(100) в зависимости от состава слоя

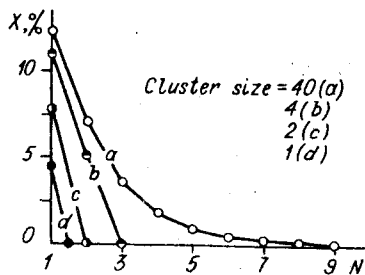


Рис. 2. Изменение смещения атомов в кластере от границы ($N = 0$) к его центру при различных размерах кластера для каждой кривой

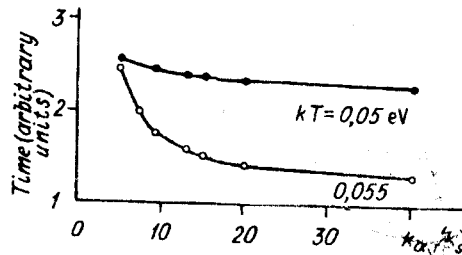


Рис. 3. Среднее время формирования дефектов в зависимости от отношения k_a/k_c для разных температур роста

бытий воссоздавалась с применением метода Монте-Карло [40].

На рис. 2 показано распределение деформации от границы к центру поверхностного кластера при росте слоя CdTe на подложке GaAs с несоответствием решеток 14,6 % [41]. Хорошо видно, что деформация важна лишь для немногих атомов вблизи границы кластера и не зависит от размера кластера, за исключением очень малых кластеров.

Граничные дефекты соответствуют аномальным позициям адсорбированных атомов, т. е. атомам, связанным с двумя ближайшими атомами подложки. Такое может произойти, если деформация в подложке достаточно существенна. Моделирование выращивания одного атомного слоя показывает, что дефекты не появляются, если модуль сдвига материала подложки k_s много меньше, чем у осаждаемого слоя k_a . Это видно на рис. 3, где среднее время формирования граничных дефектов представлено в зависимости от отношения k_a/k_s для несоответствия решеток 14,6 % [41]. Эти результаты позволяют оценить критическую толщину формирования граничных дефектов в предположении, что N атомных слоев эквивалентны одному слою с модулем Nck_a , где c — поправка, равная примерно 1,5. Мы можем, следовательно, определить по рис. 3 критическую толщину в три атомных слоя для случая двух материалов со сравнимыми модулями и несоответствием в 14,6 % и в восемь атомных слоев для случая CdTe/GaAs. Эти результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными [42, 43]. Влияние температуры состоит в облегчении появления дефектов, но только при толщине больше критической. Из рис. 3 можно определить вторую толщину, при которой дефекты гораздо легче образуются при более высоких температурах.

Заключение. Модели сплошной среды в упругом приближении весьма полезны для понимания критической толщины образования граничных дефектов и ее оценки в случае малых несоответствий решетки. В случае больших несоответствий получаемая критическая толщина оказывается менее одного атомного слоя, поэтому приближение сплошной среды неприменимо.

Модели в атомном масштабе получили развитие с применением простых моделей энергии взаимодействия. Моделирование дает критические толщины, хорошо согласующиеся с экспериментальными. Эти модели должны получить дальнейшее развитие, так как они позволяют изучить физические механизмы образования пространственных дефектов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Frenkel J., Kontorowa T. // Physik Z. Sowjetunion.—1938.—13.—S. 1.
2. Frank F. C., Van der Merwe J. H. // Proc. Roy. Soc.—1949.—A198.—P. 205.
3. Frank F. C., Van der Merwe J. H. // Proc. Roy. Soc.—1949.—A200.—P. 125.
4. Frank F. C., Van der Merwe J. H. // Proc. Roy. Soc.—1949.—A198.—P. 216.
5. Burton W. K., Cabrera N., Frank F. C. // Phil. Trans. Roy. Soc.—1951.—A243.—P. 299.
6. Sharan S., Narayan J. // J. Appl. Phys.—1989.—66.—P. 2376.
7. Dang Le Si, Cibert J., Gobil Y. et al. // Appl. Phys. Lett.—1989.—55.—P. 235.

8. Hauenstein R. J., Clemens B. M., Miles R. H. et al. // J. Vac. Sci. Tech.—1989.—B7.—P. 767.
9. Shang Lin Weng // J. Appl. Phys.—1989.—66.—P. 2217.
10. Gossmann H. J., Davidson B. A., Gualtieri G. J. et al. // Ibid.—P. 1687.
11. Van der Merwe J. H., Jesser W. A. // J. Appl. Phys.—1988.—64.—P. 4968.
12. Van der Merwe J. H. // Phil. Mag.—1982.—A45.—P. 145.
13. Matthews J. W. // Epitaxial Growth /Ed. J. W. Matthews.—N.Y.: Acad. press, 1975.
14. Luryi S., Suhir E. // Appl. Phys. Lett.—1986.—49.—P. 140.
15. People R., Bean J. C. // Appl. Phys. Lett.—1985.—47.—P. 322.
16. Matthews J. W., Mader S., Light T. B. // J. Appl. Phys.—1970.—41.—P. 3800.
17. Van der Merwe J. H. // J. Appl. Phys.—1963.—34.—P. 123.
18. Van der Merwe J. H. // Proc. Phys. Soc.—1950.—A63.—P. 616.
19. Alexander H., Haasen P. // Solid State Phys.—N.Y.: Acad. press, 1968.—Vol. 22.
20. Nabarro F. R. N. // Theory of Crystal Dislocations.—Oxford: Clarendon press, 1967.
21. Jesser W. A., Matthews J. W. // Phil. Mag.—1967.—15.—P. 1097.
22. Jesser W. A., Matthews J. W. // Phil. Mag.—1968.—17.—P. 461.
23. Jesser W. A., Matthews J. W. // Ibid.—P. 595.
24. Matthews J. W., Crawford J. L. // Thin Solid Films.—1970.—5.—P. 187.
25. Matthews J. W., Blakeslee A. E. // J. Cryst. Growth.—1974.—27.—P. 118.
26. Van der Merwe J. H., Jesser W. A. // J. Appl. Phys.—1988.—63.—P. 1509.
27. Jesser W. A., Van der Merwe J. H. // Ibid.—P. 1928.
28. Van de Leur R. H. M., Schellingerhout A. J. G., Tuinstra F., Mooji J. E. // J. Appl. Phys.—1988.—64.—P. 3043.
29. Dodson B. W., Tsao J. Y. // Appl. Phys. Lett.—1987.—51.—P. 1325.
30. Dodson B. W. // J. Cryst. Growth.—1988.—91.—P. 649.
31. Tsao J. Y., Dodson B. W. // Appl. Phys. Lett.—1988.—53.—P. 848.
32. Dodson B. W., Tsao J. Y. // Ibid.—P. 2498.
33. Bean J. C., Feldman L. C., Fiory A. T. et al. // J. Vac. Sci. Techn.—1984.—A2.—P. 436.
34. Tiller W. A. // J. Cryst. Growth.—1984.—70.—P. 13.
35. Stillinger F., Weber T. // Phys. Rev.—1985.—B31.—P. 5262.
36. Keating P. N. // Phys. Rev.—1966.—145.—P. 637.
37. Martin R. M. // Phys. Rev.—1970.—B1.—P. 4005.
38. Ghaisas S. V., Madhukar A. // Appl. Phys. Lett.—1988.—53.—P. 1599.
39. Ghaisas S. V., Madhukar A. // J. Appl. Phys.—1989.—65.—P. 1888.
40. Esteve D., Djafari Rouhani M., Pham V. V. et al. // Proc. SPIE Conf. on the Growth of Advanced Semiconductor Structures, Newport Beach, Calif. USA, 1988.
41. Djafari Rouhani M., Laroussi M., Amrani A., Esteve D. // J. Cryst. Growth.—1990.—101.—P. 122.
42. Cibert J., Gobil Y., Dang Le Si et al. // Appl. Phys. Lett.—1990.—56.—P. 292.
43. Tatarenko S., Cibert J., Feuillet G. et al. // Proc. First Conf. on Epitaxial Growth.—Budapest, Hungary, 1990.

Поступила в редакцию 11 ноября 1991 г.

УДК 621.315

Е. Г. Батюхно, В. П. Беспалов, В. И. Кольдяев

(Новосибирск)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТОКА УТЕЧКИ p-n-ПЕРЕХОДА В СБИС В ДВУМЕРНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Методом математического моделирования исследованы токи утечки одного из элементов СБИС: p-n-перехода, ограниченного криволинейной поверхностью полупроводник — диэлектрик в переходной области от тонкого к толстому диэлектрику. Сформулирована двумерная краевая задача о токе утечки в таком элементе,