

## ОЦЕНКА ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ГАЗОВОГО СМЕСИТЕЛЯ ИСХОДНЫХ КОМПОНЕНТОВ МОС-ГИДРИДНОЙ ЭПИТАКСИИ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ РЕЗКИХ ГЕТЕРОПЕРЕХОДОВ

А.А. Горский\*, аспирант

кафедра Материалов микро-, опто- и наноэлектроники

МИТХТ им. М.В. Ломоносова, Москва, 119571 Россия

\*Автор для переписки, e-mail: andrey.gorskiy@list.ru

**Р**ассмотрены перспективы использования газового смесителя исходных компонентов для получения более резких гетеропереходов в реакторах МОС-гидридной эпитаксии. Создана 3D модель смесителя, включающая в себя уравнения потока и бинарной диффузии компонентов.

На основе расчетов с использованием параметров рабочей установки и сравнения результатов с лабораторными исследованиями сделан вывод о нецелесообразности применения таких смесителей для реакторов горизонтального типа.

**Ключевые слова:** МОС-гидридная эпитаксия,  $In_xGa_{1-x}As$ , газовый смеситель, резкие гетеропереходы, моделирование, 3D модель.

### Введение

Твердые растворы  $In_xGa_{1-x}As$ ,  $Al_xGa_{1-x}As$  и  $In_xAl_{1-x}As$  ( $x=0.51 - 0.54$ ) являются основными материалами для создания полупроводниковых оптоэлектронных приборов с эффектами квантования [1–4]. Одним из примеров таких приборов является лавинный фотодиод. Благодаря большей чувствительностью по сравнению с другими полупроводниковыми фотоприемниками, его можно использовать для регистрации малых световых мощностей ( $\approx 1$  нВт). Другим примером прибора с эффектом квантования является квантово-каскадный лазер, излучающий в ближнем и дальнем инфракрасном диапазоне. Конструирование лавинных фотодиодов и квантово-каскадных лазеров осуществляется с помощью чередования эпитаксиальных нанослоев разного состава. Для обеспечения оптимальных выходных параметров структур требуется не только достижение равномерности по составу, толщине и степени легирования по поверхности слоя, но и обеспечение этих параметров в объеме слоя. Одним из главных критериев исходного расчета и конструирования гетероструктуры являются четкие границы между слоями, резкие гетеропереходы.

Существует несколько основных методов эпитаксиального роста полупроводниковых гетероструктур [5]. Наиболее перспективным и развивающимся методом является метод осаждения металлоорганических соединений из газовой фазы (МОС-гидридная эпитаксия). Важной особенностью метода является возможность выращивания широкого спектра многослойных композиций. Он выгодно отличается возможностью получения эпитаксиальных слоев на большой площади, невысокой скоростью роста, позволяющей выращивать квантоворазмерные слои, а также наличием одной температурной зоны в реакторе. Это облегчает управление процессом. Кроме того, метод характеризуется вполне умеренной стоимостью

необходимого оборудования и исходных веществ. Однако требования к чистоте исходных материалов здесь особенно высоки.

Реакторы МОС-гидридного эпитаксиального роста бывают горизонтального и вертикального (душевого) типа. В реакторах горизонтального типа равномерность по составу и толщине выращенного слоя достигается за счет вращения пьедестала, установленного параллельно потоку смеси или за счет установки подложкодержателя под углом к потоку смеси. В случае реакторов душевого типа характерна подача смеси исходных компонентов с газом-носителем на вращающийся подложкодержатель перпендикулярно. Как правило, смешение исходных компонентов происходит в газопроводе без применения дополнительных приспособлений и устройств. На вход реактора поступает однородный поток парогазовой смеси (ПГС) исходных компонентов и газа-носителя.

Целью данной работы является выявление возможности использования газового смесителя определенного типа и геометрии для обеспечения дополнительного контроля расхода, а, следовательно, и состава ПГС, непосредственно на входе реактора МОС-гидридной эпитаксии горизонтального типа прямоугольного сечения с вращающимся подложкодержателем и индукционным нагревом.

### Экспериментальная часть

Исходными веществами служили триметилиндий (ТМИ, ЕТ0.035.648ТУ), триэтилгаллий (ТЕГ, ЗАО «ЭЛМА-ХИМ») и арсин ( $AsH_3$ , ЯеО.036.003ТУ); газ-носитель – водород ( $H_2$  техн., ГОСТ 3022-80); в качестве моделируемой системы рассматривали смешение основных исходных компонентов и условия роста слоев  $In_xGa_{1-x}As$  ( $x=0.53$ ) и  $In_xAl_{1-x}As$  ( $x=0.52$ ).

При моделировании процессов использовали параметры реального рабочего реактора ОАО «НИИ «Полюс» им. М.Ф. Стельмаха.

Он представляет собой газовый смеситель с двумя входами, по которым раздельно подаются исходные компоненты элементов V и III группы в газе-носителе. Потoki разделяются на девять струй (четыре для III группы и пять – для V группы). Изменение геометрии и разделение исходного потока ПГС на множество потоков разного состава может существенно повлиять на параметры выращиваемых слоев, а именно, снизить однородности по составу и толщине и в объеме выращенного слоя и по поверхности слоя.

На выходе из смесителя установлена сетка из нержавеющей стали, которая обеспечивает перепад давлений при смешении в объеме газового смесителя. Перепад давлений между входом смесителя (газопровод) и выходом (реактор) составляет от 200 mBar до 30–40 mBar. Температура неизменна и равна 20°C.

Смеситель смоделирован в программной среде COMSOL Multiphysics [6], использующей численные решения сложных моделей на основе методов конечных элементов (МКЭ) [7]. На рис.1 представлена 3D модель смесителя.

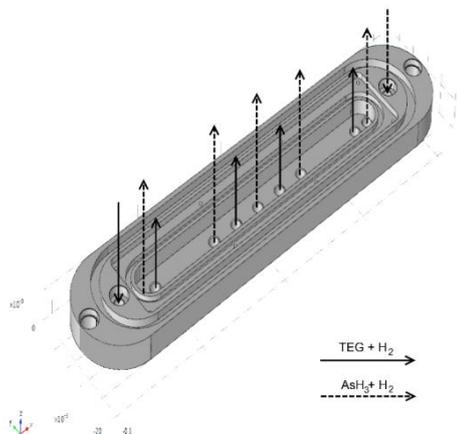


Рис. 1. Схема газового смесителя с двумя входами.

Созданная нами 3D модель включает в себя уравнения Навье-Стокса, описывающие баланс моментов скоростей и уравнения бинарной диффузии исходных компонентов в газе-носителе (водороде). Коэффициент бинарной диффузии зависит от температуры среды, давления и состава:

$$D = 2.695 \cdot 10^{-3} \cdot \sqrt{\frac{T^3 \left( \frac{M_A + M_B}{2 \cdot 10^3 M_A M_B} \right)}{r \sigma_A \sigma_B \Omega_D}} \quad (1)$$

где  $M_A, M_B$  – молекулярные массы частиц,  $T$  – температура,  $p$  – давление,  $\sigma_A, \sigma_B, \varepsilon/k_b$  – параметры Леннарда – Джонса,  $\Omega_D$  – интеграл столкновений:  $\Omega_D = f \left( T, \frac{\varepsilon}{k_b}, \sigma \right)$ .

Начальные скорости и концентрации рассчитаны с учетом расходов исходных компонентов и водорода в барботерах. Необходимые для расчета потенциалы Леннарда-Джонса [8] взяты из отчета NASA [9].

### Результаты и их обсуждение

На рис. 2 представлены результаты расчета концентрации  $AsH_3$  при разном давлении.

Очевидно, что характер распределения компонента не зависит от давления в рабочих диапазонах реактора и возможных перепадах давления за счет пористой сетки на выходе смесителя. Хотя предполагалось, что при увеличении перепада возможен переход от ламинарного к турбулентному режиму потоков, этого не произошло в рамках диапазонов, используемых на предприятии. Давление в газопроводе менялось от 200 до 300 mBar. В результате наложения результатов по двум исходным компонентам газовый смеситель создает три потока: два периферийных и широкий центральный (рис.2, б). Такой же результат дали исследования, проведенные на предприятии ОАО «НИИ «Полус» им. М.Ф. Стельмаха.

По-видимому, полученный результат обусловлен тем, что в реакторах горизонтального типа поток исходных компонентов идет параллельно области роста. Возможно, для реакторов душевого типа, где поток идет по нормали к подложкодержателю, использование смесителя позволит улучшить контроль за расходами исходных компонентов и, как следствие, получить более резкие гетеропереходы.

### Заключение

Показано, что 3D-модель газового смесителя, созданная в программной среде COMSOL Multiphysics [6], пригодна для исследования возможностей и перспектив использования смесителей в установках МОС-гидридной эпитаксии. Установлено, что в рабочих диапазонах параметров реальной установки горизонтального типа (ОАО «НИИ «Полус» им. М.Ф. Стельмаха) характер смешения исходных компонентов не меняется. Отсюда сделан вывод о невозможности использования смесителя для данной установки горизонтального типа.

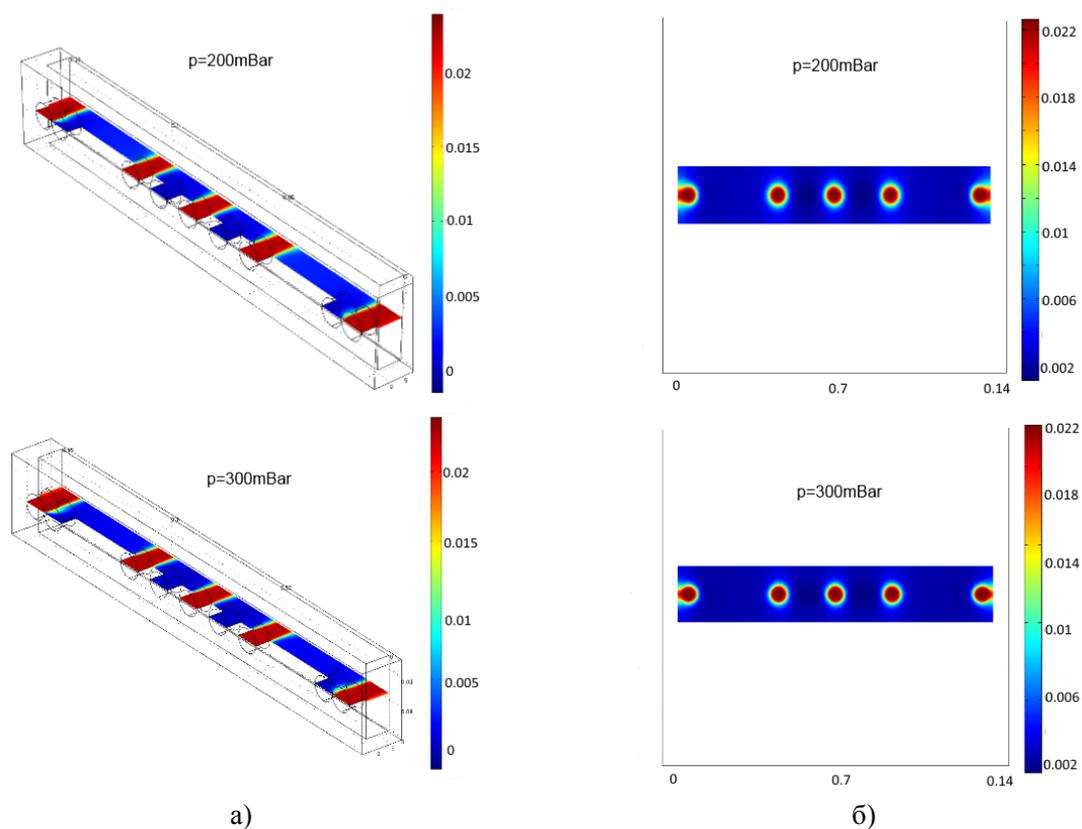


Рис. 2. Концентрация  $\text{AsH}_3$  при различных давлениях а) в сечении и б) на выходе газового смесителя.

#### ЛИТЕРАТУРА:

1. Rogalski A. Quantum well photoconductors in infrared detector technology // Appl. Phys. R. 2003. V. 93. P. 4355–4391.
2. Zhao J.H., Tang X.H., Mei T., Zhang B.L., Huang G.Sh. MOCVD growth of InGaAsP/InGaAs multi-step-quantum well structure for QWIP application by using TBA and TBP in  $\text{N}_2$  ambient // J. Crystal Growth. 2004. V. 268. P. 432–436.
3. Nguyen L.D., Brown A.S. [et al.]. 50-nm Self-Aligned-Gate Pseudomorphic AlInAs/GaInAs high electron mobility transistors // IEEE Trans. on Electron Devices. 2007. V. 39. № 9. P. 2007–2013.
4. Diez E., Chen Y.P., Cervero J. M. Two-dimensional electron gas in InGaAs/InAlAs quantum wells // Appl. Phys. Lett. 2006. V. 88. P. 052107-1–052107-3
5. Белявский В.И. Физические основы полупроводниковой нанотехнологии // Соросовский образовательный журнал. 1998. № 10. С. 92–98
6. Официальная страница программного продукта <http://www.comsol.com/> (04.04.2014)
7. Зенкевич О. Метод конечных элементов в технике. М.: Мир, 1975. 310 с.
8. Neufeld P.D., Janzen A.R., Aziz R.A. Empirical equations to calculate 16 of the transport collision integrals (l; s) for the Lennard-Jones (12-6) potential // J. Chem. Physics. 1972. V. 57. P. 1100–1102.
9. Lennard-Jones J.E. On the determination of molecular fields // Proc. Roy. Soc. 1924. V. A106. P. 463–477.

## THE ESTIMATION OF POSSIBILITY OF THE USING GAS MIXER FOR OBTAINING SHARPER MOCVD GROWN HETEROJUNCTIONS

A.A. Gorskiy<sup>@</sup>

M.V. Lomonosov Moscow State University of Fine Chemical Technologies, Moscow, 119571 Russia

<sup>@</sup> Corresponding authore-mail: [andrey.gorskiy@list.ru](mailto:andrey.gorskiy@list.ru)

In this paper, we investigate the possibility of using gas mixer precursor for MOCVD to get sharper heterojunctions  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ,  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  u  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ . Nanolayers of that compositions are using in creations of quantum well devices like avalanche photodiode, QWIPs and so on. This devices needs sharp heterojunctions. For this purpose we used numerical studies of momentum and mass transport equations. 3D model of mixer was built in COMSOL Multiphysics. Results shows three streams: two peripheral and wide central. The shape and behavior was found independent from studying pressure ranges. That leads to applications of such gas mixer for vertical reactors of MOCVD but not for horizontal reactors.

**Keywords:** 3D model, MOCVD, MOVPE, horizontal rector, gas mixer,  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , numerical studying, heterojunctions.