分子線エピタキシ薄膜の膜厚分布

シミュレーション*

川田 洋揮**・高橋 主人**

(受付1990年12月18日, 掲載決定1991年2月2日)

Simulation of Thickness Distribution of Thin Film
Grown by Molecular Beam Epitaxy

Hiroki KAWADA** and Kazue TAKAHASHI**

(Mechanical Engineering Research Laboratory, 502, Kandatsu-machi,
Tsuchiura-shi, Ibaraki, 300 JAPAN)

(Received December 18, 1990, Accepted February 2, 1991)

1. はじめに

分子線エピタキシ (MBE) 法は, 真空中で原料を加熱蒸発させ, 基板上に単結晶の薄膜を作成する方法である。近年, MBE 法により作成された GaAs 薄膜の各種デバイス開発が, 急ピッチで進められている。デバイスの歩留まりを確保するためには, 膜厚の均一性が重要であるが, 膜厚分布は, 基板と分子線源の配置によってほぼ決まってしまう。よって, 高い均一性を得るためには, 装置の設計段階において, シミュレーションによる定量的な検討が必要となる。

これまでに, いくつかの膜厚分布シミュレータが報告され, 分子線の流量を計算する方法や^{1,2,3)}, 経験式によるもの^{4,5)}, モンテカルロ法^{6,7)}などがあるが, より高い均一性が要求されてくるのに伴い, 計算精度の向上が望まれた。

本シミュレーションでは, るつぼ内と基板上を要素分割して, 分子線の流量を計算する方法に, るつぼ内の脱離モデルを導入して精度の向上を図った。そして, Ag 膜と GaAs 膜の実験により計算精度を検討した。

2. シミュレーションの系

Fig. 1 に, 膜厚分布を計算する系のパラメータを示す。系は基板と, 原料を充填したるつぼにより構成され, これらの幾何学的な配置を任意に設定できる。Ga などの液体原料の液面の傾きや, るつぼ径が細くなっているテーパ角も考慮される。

3. 計算の仮定とるつぼ内のモデル化

以下に, シミュレーションにおける仮定を示す。

Fig. 1 Parameters of system. Crucible and wafer can be located arbitrarily. Liquid source's surface is inclined, and the crucible is tapered toward its bottom.

* 平成2年10月25日 第30回真空に関する連合講演会講演 (25P-12)

** 日立製作所機械研究所 (〒300 茨城県土浦市神立町502)

$$F = E \frac{dS_p}{2\pi|\vec{V}|^2} \times \frac{\vec{N}_p \cdot \vec{V}}{|\vec{N}_p||\vec{V}|} \times \frac{-\vec{N}_q \cdot \vec{V}}{|\vec{N}_q||\vec{V}|}$$

Fig. 2 Expression of molecular beam flux between two elements. The molecular beam is desorbed at element P in a cosine distribution, and adsorbed at element Q. Aperture from P to Q is also considered in the expression.

Fig. 3 Desorption model on the inside surface of the crucible. There are three areas where desorbing conditions are different from the others.

(1) 蒸発面及び脱離面からの分子線強度の角度分布は、余弦則に従う。

(2) 分子線はるつぼ内で付着、再脱離を繰り返し、空間中を直進する。

(3) 基板に照射されて付着した分子線は、再脱離や表面拡散せず、膜厚は分子線の照射量に比例する。

Fig. 2 に、計算の基本式を示す。要素からの脱離の総量 E に、脱離面から付着面を見込んだ立体角と、強度の角度分布（余弦則）を乗じて、分子線の流量が求められる。 E の値は、るつぼ内の各所において異なっていると考えられる。膜成長後に、Ga のるつぼを取り出してみると、成長前には何も付着していなかった出口付近の内壁上に粒状の Ga が付着している。出口付近が低温化しているために、いったん付着した Ga が、再脱離することができずに溜っていると考えられる。るつぼ内壁表面の温度は出口に向けてだんだんと下がっており、そこに付着した分子線の脱離量も低下していくはずである。

そこで、本シミュレーションでは Fig. 3 に示すように、るつぼ内壁を蒸発・脱離状況の異なる 3 つの領域に分割したモデルを新たに採用し、るつぼ内の状態を、より詳細に表現した。

濡れた領域では、液面と同様に分子線が蒸発していると考え、液面と等しい E を持つ。乾いた領域では、そこにいったん付着した分子線が全て再脱離すると考え、 $E = (\text{付着総量})$ とする。低温領域では、熱放射による温度低下により、付着した分子線に比較して、再脱離する分子線は無視できると考え、 $E = 0$ とする。 Fig. 3 のモデルを採用することにより、るつぼ内の状況をより詳細に表現できたと考えられる。

4. 計算手順

Fig. 3 により、るつぼ内の各領域における分子線の蒸発・脱離の計算順序を説明する。るつぼとウェハを要素分割した後、各要素につき以下の計算を行なう。

(1) 原料表面と濡れた領域から、分子線を蒸発させる。

(2) 乾いた領域内で分子線の脱離・付着を繰り返す。総付着量が 1% 以下に減少するまで行なう。

(3) 低温領域からは、分子線は脱離しない。

まず、基板が静止した状態での膜厚分布が計算される。それを円周方向に平均化することにより、基板を回転しながら、成長したときの膜厚分布が求められる。

5. 実験結果との比較及び考察

るつぼ内の各領域の大きさは、Fig. 4 に示すように、実験結果と比較して決定した。実験では、Si 基板に Ag 膜を蒸着した。基板上の各点の膜厚測定のために、格子点上に穴を開けたマスク板で基板を覆って蒸着し、蒸着膜と下地との段差を、触針式の表面粗さ計で測定した。

濡れた領域の長さ (H) が大きくなると、均一性が良くなる傾向がある。Al のように、るつぼ内壁へのはい上がりは、Ga や In に比べて大きな原料では、膜厚の均一性が良くなることを示唆している。るつぼ内における、Ag のはい上がりは、Ga と Al の中間程度であった。また、低温領域の長さ (T) は、主に基板の外周部における分布に影響を及ぼしている。ヒータ構造を改良して、るつぼ出口付近の高温化を進めれば、低温領域が小さくなり、膜厚均一性の向上につながることが予想され

Fig. 4 Optimization of three areas' size in the desorption model. Open circles indicate experimental results and solid lines indicate simulated results. The thickness varies very much with the wet area's length. Lengths of the wet area and the non-desorption area are chosen to be 60 mm and 20 mm, respectively.

Fig. 5 Thickness distribution of Ag film on a 3" wafer of non-rotated. Solid line indicates experimental result and broken line indicate simulation result.

Fig. 6 Thickness distribution of Ag film on a 3" wafer of rotated. Depth of the charged source are varied, while the other parameters are fixed. Solid lines and open circles indicate the simulation and experimental results, respectively. The agreement in the simulation is within 2%.

る。これら実験値との比較によって、低温領域を20 mm、濡れた領域を60 mmに固定して、以下の計算を行なうことにした。このモデル比によって、計算精度を向上できることが分かる。

計算精度の確認のため、原料の充填量を変えて膜厚分布を調べた。Fig. 5に、静止した基板上における膜厚分布を示す。実験と計算の曲線が良く一致しているのが分かる。Fig. 6に、原料の充填量を変えたときの、膜厚分布を示す。ここでは、均一性の高い膜を得るために、基板を回転させながら成長している。原料が少なくなると($d=14$ mm), 実験と計算のいずれにおいても、均一性が悪くなっている。液面から蒸発した分子線の分布が、るつぽによって絞られる影響が出ていると考えられる。計算と実験結果は、原料の充填量が変わっても、半径

30 mm 以内の範囲で、約2%幅で一致しているのが分かる。

Fig. 7に、GaAs膜を成長したときの膜厚分布を示す。こちらも、計算と実験が約2%幅で一致した。

6. まとめ

分子線エピタキシ装置において、基板上に成長する薄膜の、膜厚分布を求めるためのシミュレータを開発した、るつぽの内壁を3つの領域に分割した、新たなモデルを導入した。実験結果と比較し、るつぽ内の状況が、膜厚分布に及ぼす影響を評価した。

【文 献】

- 1) Curless, J.: J. Vac. Sci. Technol., B3(2) (1984) 531.

Fig. 7 Thickness distribution of Ag and GaAs film grown with various equipments. The agreement of the simulation is also within 2%.

- 2) Yamashita, T. et al.: Jpn. J. Appl. Phys., **26**(7) (1987) 1192.
- 3) Fujiwara, A. et al.: J. Vac. Sci. Technol., **A8**(4) (1990) 3327.
- 4) Svensson, A. et al.: J. Vac. Sci. Technol., **20**(2) (1981) 245.
- 5) Saito, J et al.: J. Crystal Growth, **81** (1987) 188.
- 6) 渡部ほか, 日本機械学会論文集B編, **54** (1988) 459.
- 7) Adamson, S. et al.: J. Vac. Sci. Technol., **B7**(3) (1989) 487.