

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ТЕХНОЛОГИИ С ПОМОЩЬЮ ИНФОРМАЦИОННО-РАСЧЕТНОЙ СИСТЕМЫ

**В.В. Арбенина[@], доцент, Р.Х. Акчурин, профессор,
Л.Б. Берлинер, ведущий научный сотрудник**

Кафедра материаловедения и технологии функциональных материалов и структур МИТХТ им. М.В. Ломоносова, Москва, 119571 Россия

[@]Автор для переписки, e-mail: arbenina@mitht.ru

Разработана информационно-расчетная система (ИРС), которая позволяет средствами компьютерной техники решать наиболее важные технологические задачи, связанные с формированием монокристаллов и эпитаксиальных гетероструктур на основе полупроводниковых соединений типа $A^III B^V$. Приведен перечень решаемых с помощью ИРС задач, даны примеры использования базы данных для конкретных полупроводниковых систем.

Ключевые слова: *информационно-расчетная система (ИРС), полупроводниковая технология, диаграмма фазового состояния, квазибинарный разрез.*

COMPUTER MODELING OF PROCESSES OF SEMICONDUCTOR TECHNOLOGY THROUGH INFORMATION-CALCULATING SYSTEM

V.V. Arbenina[@], R.Kh. Akchurin, L.B. Berliner

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

[@]Corresponding author e-mail: arbenina@mitht.ru

An information-calculating system (ICS) that allows computer simulation of processes of semiconductor technology associated with the formation of single crystals and epitaxial heterostructures based on semiconductor $A^III B^V$ compounds was developed. The ICS database covers 9 of $A^III B^V$ compounds and solid solutions based on semiconductor $A^III B^V$ compounds in 18 ternary and 15 four-component systems. The ICS allows solving problems related to the calculation of heterogeneous equilibria in these systems, stability of the formed solid solutions to decay, kinetics of epitaxial growth of heterostructures and non-equilibrium phenomena accompanying heteroepitaxy. In order to create the ICS, we used object-oriented programming Object Windows application programs compiled in the programming language Borland C++ in the Windows environment. Examples of the use of the database for particular semiconductor systems are presented. The above list of problems could be solved with the use of the ICS. The ICS can be used both in research and in educational practice.

Keywords: *information-calculating system (ICS), semiconductor technology, the phase equilibrium diagram, the quasi-binary section.*

Введение

Распространение высокопроизводительной вычислительной техники делает актуальной разработку программных продуктов, обеспечивающих моделирование процессов полупроводниковой технологии. Благодаря возможностям современных компьютеров время выполнения весьма трудоемких расчетов предельно сокращается, а их результаты могут быть

представлены в наглядной графической форме. Это делает удобным и целесообразным использование таких программных продуктов не только в исследовательской, но и в учебной практике.

В статье описывается информационно-расчетная программа (ИРС), созданная для моделирования процессов получения полупроводниковых материалов. В качестве объекта моделирования выбраны полупроводниковые соединения типа $A^III B^V$ и твердые

растворы на их основе, которые широко используются в качестве материальной базы оптоэлектроники.

База данных ИРС

ИРС включает в себя базу данных по основным термодинамическим и физико-химическим параметрам полупроводниковых соединений типа $A^{III}B^V$. Структурирование данных произведено с учетом необходимости решения разноплановых задач, связанных с информационно-расчетным обеспечением процессов получения монокристаллов и эпитаксиальных структур на основе соединений типа $A^{III}B^V$ и их твердых растворов. ИРС позволяет осуществлять расчеты гетерогенных равновесий в трех- и четырехкомпонентных системах на основе элементов III и V групп Периодической системы с построением изотермических и политермических сечений диаграмм фазового состояния, границ областей устойчивости и изопериодных бинарным соединениям $A^{III}B^V$ составов твердых растворов. Она включает также задачи по кинетике процессов выращивания монокристаллических слоев для создания гетероструктур.

В разработке ИРС использована система объектно-ориентированного программирования Object Windows, прикладные программы составлены с использованием языка программирования Borland C++ в среде Windows. Разработанные программные средства выполнены на основе многодокументного интерфейса в виде диалоговых и графических окон, удобных для проигрывания модельных ситуаций и быстрого просмотра информационного материала.

В базу данных включено девять двухкомпонентных фаз – соединений $A^{III}B^V$: AlP, AlAs, AlSb, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs и InSb, для которых заложены следующие параметры:

- температура плавления ($T_{пл}$),
- энтропия плавления ($\Delta S_{пл}$),
- ширина запрещенной зоны (E_g при 300 K / 77 K),
- параметр кристаллической решетки (a),
- коэффициент термического расширения (α),
- показатель оптического преломления (n),
- тензоры модуля упругости кристаллической решетки (C_{11}, C_{12}, C_{44}),
- параметры взаимодействия между различными компонентами в жидкой фазе $\alpha_{ж} = A - BT$, представляемые коэффициентами температурной зависимости A и B; на экране/распечатке они приводятся вместе с расчетными значениями сосуществующих при данной температуре составов жидкой и твердой фаз.

На рис. 1а показано окно для ввода или выбора приоритетных значений свойств соединений $A^{III}B^V$ на примере соединения InSb, которое открывается при последовательной активации кнопок: «двухком-

понентные системы», «характеристики бинарных соединений». Просмотр значений свойств других соединений $A^{III}B^V$ осуществляется элементом спускающегося меню «Система» (блок Combox). После активации кнопки, например, «Энтропия плавления», на экране появляется модальное окно с идентичным названием, в котором приведен список альтернативных значений энтропии плавления InSb по различным литературным источникам. При активации кнопки «Литература» появляется модальное окно с полным наименованием источника, соответствующего указанному номеру в списке. Выбор нового значения параметра из списка имеющихся в «ListBox» осуществляется позиционированием курсора «мыши» на выбранном значении.

На рис. 1б показано окно для ввода или выбора приоритетного значения параметров взаимодействия в жидкой фазе на примере взаимодействия компонентов в системе In – Sb, открывающееся при последовательной активации кнопок: «двухкомпонентные системы», «параметры взаимодействия в жидкой фазе». Просмотр параметров взаимодействия в других двухкомпонентных системах и выбор значения параметра взаимодействия из списка имеющихся в «ListBox» осуществляется позиционированием курсора «мыши» на выбранной системе, затем на выбранном значении.

В базу данных включены свойства твердых растворов, образующихся между двумя соединениями типа $A^{III}B^V$ в 18 трехкомпонентных системах: Al-Ga-P, Al-Ga-As, Al-Ga-Sb, Al-In-P, Al-In-As, Al-In-Sb, Ga-In-P, Ga-In-As, Ga-In-Sb, In-As-P, In-Sb-As, In-Sb-P, Al-As-P, Al-Sb-As, Al-Sb-P, Ga-As-Sb, Ga-P-Sb и Ga-P-As. Для них заложены следующие параметры:

- √ концентрационная зависимость ширины запрещенной зоны твердых растворов, которая для конкретного твердого раствора рассчитывается по квадратичному уравнению $E_g = A + B \cdot x + C \cdot x^2$, коэффициенты которого A, B, C представлены в окне;
- √ показатель оптического преломления, который для конкретного твердого раствора рассчитывается по линейному уравнению $n = A - B \cdot x$, коэффициенты которого A и B представлены в окне;
- √ параметр кристаллической решетки твердого раствора, который для конкретного твердого раствора рассчитывается по линейному уравнению $a = A + B \cdot x$, коэффициенты которого A, B представлены в окне;
- √ коэффициент термического расширения твердого раствора;
- √ параметры взаимодействия в твердой фазе $\alpha_{тв} = A - B \cdot T + C \cdot x + D \cdot x \cdot T$.

На рис. 2 показано окно с приоритетными значениями перечисленных параметров для твердых растворов $Ga_xIn_{1-x}As$, образующихся в системе In-

Ga-As. Каждому параметру соответствует кнопка с поясняющим названием параметра. Позиционированием курсора «мыши» на кнопке вызывается модальное окно со списком альтернативных значений

численных коэффициентов параметра, позволяющее изменить приоритет, внести исправления или данные из нового источника.

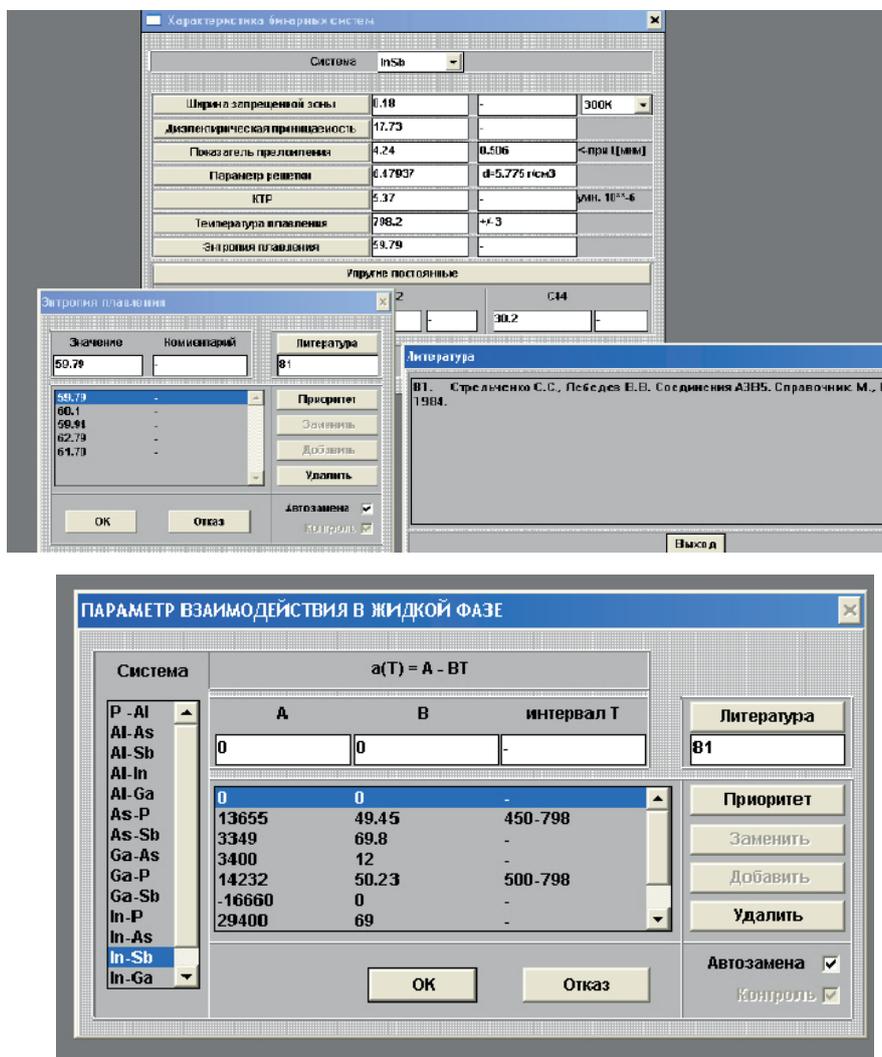


Рис. 1. Пример диалоговых окон для работы с базой данных по 2-х-компонентным системам (а – приоритетные значения физико-химических и термодинамических данных для соединения InSb; данные по энтропии плавления InSb; б – параметры взаимодействия в жидкой фазе, имеющиеся в литературе для системы In – Sb).

В базу данных включены параметры четырех-компонентных твердых растворов, образующихся между соединениями A^{III}B^V в 15 системах:

1) твердые растворы типа A_xB_{1-x}C_yD_{1-y} со смешением атомов на двух подрешетках структуры сфалерита – в 9 системах (Al-Ga-P-As, Al-Ga-As-Sb, Al-Ga-P-Sb, Al-In-P-As, Al-In-As-Sb, Al-In-P-Sb, Ga-In-P-As, Ga-In-As-Sb, Ga-In-P-Sb);

2) твердые растворы типа A_xB_yC_{1-x-y}D со смешением атомов на катионной подрешетке структуры сфалерита – в 6 системах (Al-P-As-Sb, Ga-P-As-Sb, In-P-As-Sb, Al-Ga-In-P, Al-Ga-In-As и Al-Ga-In-Sb), для которых заложены следующие параметры:

√ ширина запрещенной зоны твердого раствора, которая для конкретного твердого раствора рассчитывается по квадратичному уравнению $E_g = A + B \cdot x + C \cdot x^2 + D \cdot y + G \cdot y^2 + K \cdot x \cdot y + M \cdot x \cdot y^2 + N \cdot x^2 \cdot y$, коэффициенты которого A, B, C, D, G, K, M, N представлены в окне;

√ параметр кристаллической решетки твердого раствора, который для конкретного твердого раствора рассчитывается по уравнению $a = A + B \cdot x + C \cdot y + D \cdot x \cdot y$, коэффициенты которого A, B, C, D представлены в окне;

√ показатель оптического преломления твердого раствора $n = f(x, y)$;

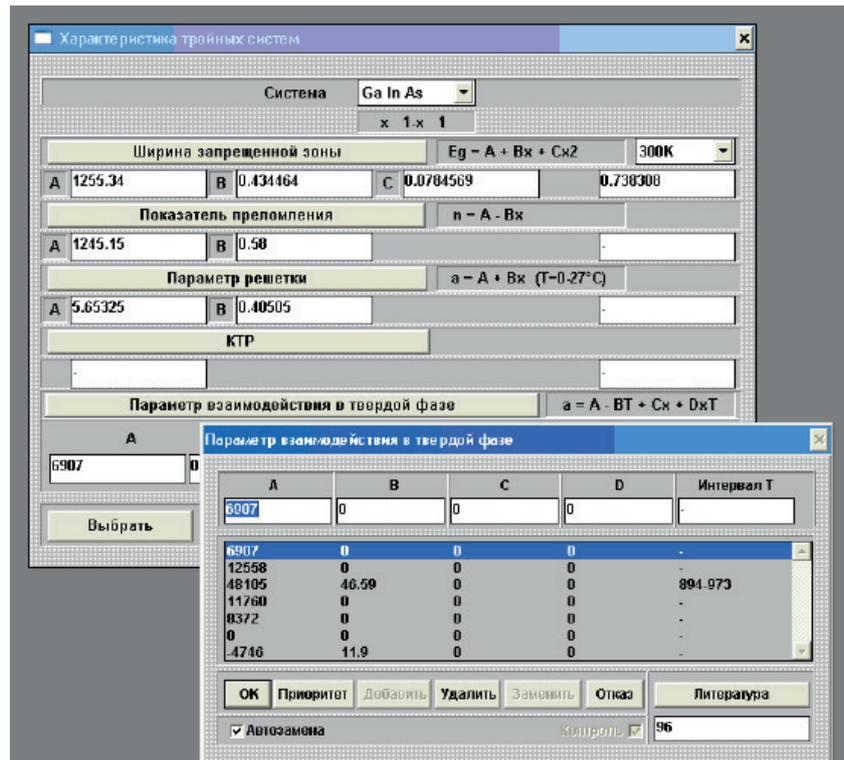


Рис. 2. Пример диалогового окна для работы с базой данных по трехкомпонентным системам (окно с приоритетными значениями параметров твердых растворов $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$).

√ коэффициент термического расширения твердого раствора $\alpha = f(x, y)$;

√ коэффициенты диффузии компонентов в жидкой фазе D_i .

Таким образом, непосредственная работа с базой данных предусматривает, помимо стандартных операций просмотра и редактирования в информационном режиме, возможность интерактивной модификации данных в процессе выполнения расчетов и установку приоритетных значений по наиболее достоверным источникам для последующего использования их в расчетных задачах.

Перечень решаемых с помощью ИРС задач

Структура входных и выходных форм диалогового интерфейса позволяет пользователю на основе предлагаемого меню осуществлять выбор решаемых задач. Разработанные программные средства выполнены на основе многодокументного интерфейса в виде диалоговых и графических окон, удобных для проигрывания модельных ситуаций и быстрого просмотра информационного материала, необходимого для решения прикладных технологических задач. Каждой задаче соответствует управляющее окно с обязательным элементом спускающегося меню «Система». При выборе конкретной многокомпонентной системы производится автоматическая разбивка ее на составляющие и извлечение из различных разде-

лов базы данных значений параметров, необходимых для компьютерного моделирования.

I. Расчеты гетерогенных равновесий в точке

1. Расчет равновесной температуры (Т) и сосуществующего состава (х) твердых растворов типа $A_xB_{1-x}C$ или AB_yC_{1-y} ($B_xC_{1-x}A$) по заданному составу жидкой фазы.

При повторных расчетах для других составов жидкой фазы либо при измененных параметрах модели, а также расчетах иных систем оконные формы накапливаются на экране дисплея, что позволяет оперативно осуществлять сравнение и анализ получаемых результатов.

2. Расчет равновесных температуры (Т) и состава (х, у) твердых растворов типа $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ или $A_xB_yC_{1-x-y}D$ по заданному составу жидкой фазы.

3. Расчет равновесного состава жидкой фазы при заданных температуре и составе твердой фазы в трех- и четырехкомпонентных системах.

II. Построение Т-Х-сечений фазовых диаграмм состояния

1. Построение квазибинарных сечений трехкомпонентных диаграмм состояния.

На рис. 3, 4 показана оконная форма, реализующая данную функцию. Расчет положения кривых ликвидуса и солидуса сделан в предположении, что

жидкая и твердая фазы представляют собой строго регулярные растворы. В условиях термодинамического равновесия составы жидкой и твердой фаз в полупроводниковых системах могут быть с достаточной степенью приближения рассчитаны на осно-

ве регулярной модели растворов (модели Гуггенгейма в приближении Виланда [1, 2]*).

В случае трехкомпонентных систем с образующимися в них твердыми растворами типа $A_xB_{1-x}C$ имеем [3]:

$$RT \cdot \ln x + \alpha_{AC-BC}(1-x)^2 = \Delta S_{AC}^F \cdot (T_{AC}^F - T) + RT \cdot \ln(4x_Ax_C) - 0,5 \cdot \alpha_{A-C} + RT \cdot \ln(\gamma_A \cdot \gamma_C);$$

$$RT \cdot \ln(1-x) + \alpha_{AC-BC}x^2 = \Delta S_{BC}^F \cdot (T_{BC}^F - T) + RT \cdot \ln(4x_Bx_C) - 0,5 \cdot \alpha_{B-C} + RT \cdot \ln(\gamma_A \cdot \gamma_C),$$
(3)

где

$$RT \ln \lambda_A = \alpha_{A-B} \cdot x_B^2 + \alpha_{A-C} \cdot x_C^2 + (\alpha_{A-B} + \alpha_{A-C} - \alpha_{B-C}) \cdot x_Bx_C,$$

$$RT \ln \lambda_B = \alpha_{A-B} \cdot x_A^2 + \alpha_{B-C} \cdot x_C^2 + (\alpha_{A-B} + \alpha_{B-C} - \alpha_{A-C}) \cdot x_Ax_C,$$

$$RT \ln \lambda_C = \alpha_{A-C} \cdot x_A^2 + \alpha_{B-C} \cdot x_B^2 + (\alpha_{A-C} + \alpha_{B-C} - \alpha_{A-B}) \cdot x_Ax_B,$$

а связь атомных долей компонентов в твердой фазе со стехиометрическими коэффициентами выражается соотношениями: $x_A = 0,5 \cdot x$; $x_B = 0,5 \cdot (1-x)$; $x_C = 0,5$.

Аналогичные уравнения для четырехкомпонентных систем с образующимися в них твердыми растворами типа $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ имеют вид [4]:

$$RT \cdot \ln xy + \alpha_{ACD-BCD}(1-x)^2 + \alpha_{CAB-DAB}(1-y)^2 - \alpha_C(1-x) \cdot (1-y) = \Delta S_{AC}^F(T_{AC}^F - T) + RT \cdot \ln 4x_Ax_C - 0,5 \cdot \alpha_{A-C} + RT \ln \gamma_A\gamma_C,$$

$$RT \cdot \ln x \cdot (1-y) + \alpha_{ACD-BCD}(1-x)^2 + \alpha_{CAB-DAB}y^2 + \alpha_C(1-x) \cdot y = \Delta S_{AD}^F(T_{AD}^F - T) + RT \cdot \ln 4x_Ax_D - 0,5 \cdot \alpha_{A-D} + RT \ln \gamma_A\gamma_D,$$

$$RT \cdot \ln(1-x) \cdot y + \alpha_{ACD-BCD}x^2 + \alpha_{CAB-DAB}(1-y)^2 + \alpha_Cx \cdot (1-y) = \Delta S_{BC}^F(T_{BC}^F - T) + RT \cdot \ln 4x_Bx_C - 0,5 \cdot \alpha_{B-C} + RT \ln \gamma_B\gamma_C,$$
(4)

где

$$\alpha_C = \Delta S_{AD}^F(T_{AD}^F - T) + \Delta S_{BC}^F(T_{BC}^F - T) - \Delta S_{AC}^F(T_{AC}^F - T) - \Delta S_{BD}^F(T_{BD}^F - T) - 0,5 \cdot (\alpha_{A-C} + \alpha_{B-D} - \alpha_{A-D} - \alpha_{B-C});$$

$$\alpha_{ACD-BCD} = y \cdot \alpha_{AC-BC} + (1-y) \cdot \alpha_{AD-BD}, \alpha_{CAB-DAB} = x \cdot \alpha_{AC-AD} + (1-x) \cdot \alpha_{BC-BD};$$

$$RT \cdot \ln \gamma_i = \sum_{j=1, j \neq i}^4 \alpha_{i-j} \cdot x_j^2 + \sum_{k=1, k \neq i}^4 \sum_{j=k+1}^4 (\alpha_{i-k} + \alpha_{i-j} - \alpha_{k-j}); \quad i, j, k = 1 \leftrightarrow A, 2 \leftrightarrow B, 3 \leftrightarrow C, 4 \leftrightarrow D,$$

а $x_A = 0,5 \cdot x$; $x_B = 0,5 \cdot (1-x)$; $x_C = 0,5 \cdot y$ и $x_D = 0,5 \cdot (1-y)$.

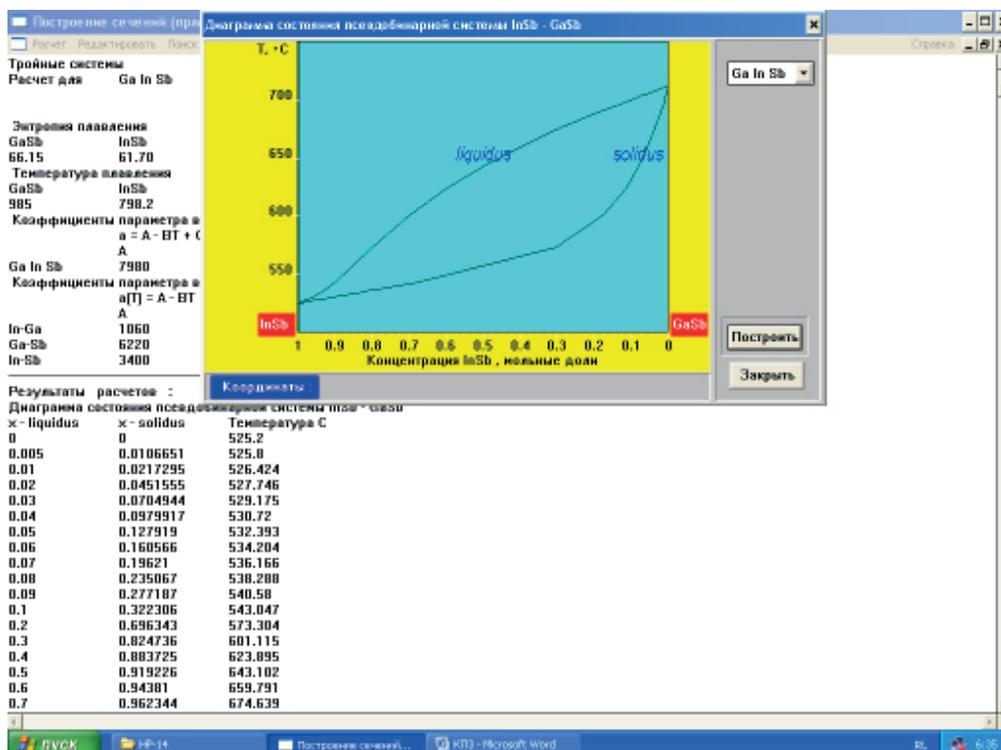


Рис. 3. Пример расчета квазибинарного разреза системы Ga-In-Sb.

* Указанные публикации являются классическими.

Координаты графика в цифровом виде выводятся на экран позиционированием курсора «мыши» на выбранной точке. Предусмотрен вывод используе-

мых параметров модели и результатов счета также в табличной форме.

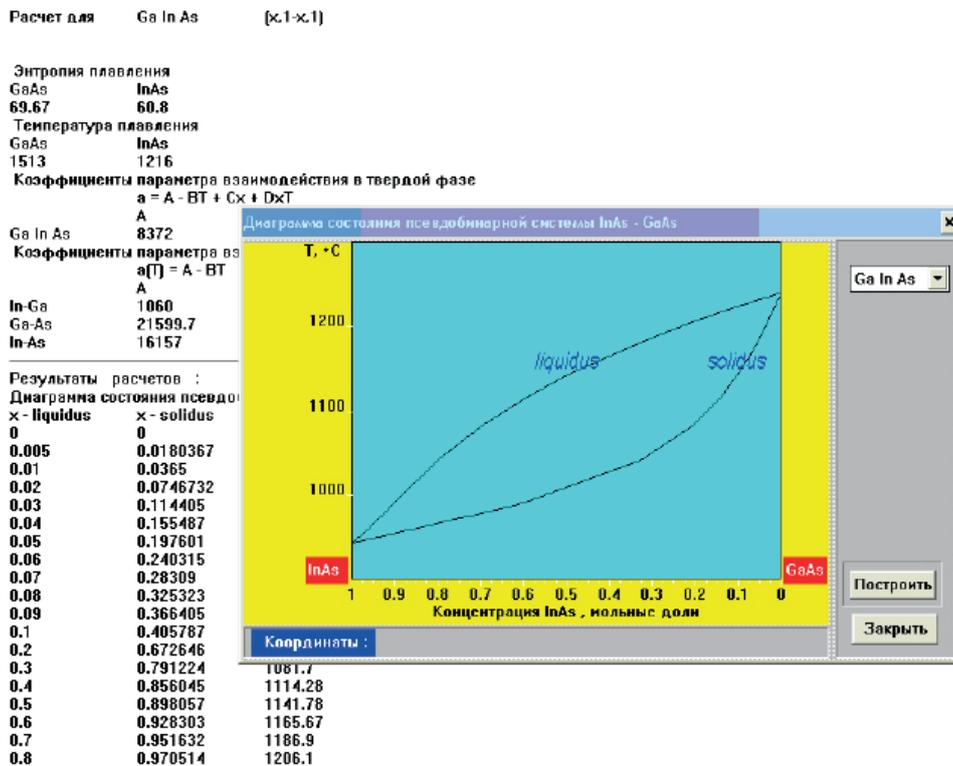


Рис. 4. Пример расчета квазибинарного разреза системы Ga-In-As.

Выбрав из базы данных соответствующие параметры взаимодействия и приняв их в качестве приоритетных в используемой модели, можно рассчитать и построить кривые ликвидуса и солидуса для политемпературного квазибинарного сечения системы и по промежуточным моделям, например, представив жидкую фазу как квазирегулярный раствор, а твердую фазу – как идеальный раствор.

2. Построение изотерм ликвидуса и солидуса в трехкомпонентных системах.

3. Построение сечений изотерм солидуса в четырехкомпонентных системах.

III. Расчет границ областей устойчивости четырехкомпонентных твердых растворов

1. Построение сечений спинодалей для твердых растворов типа $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$.

2. Построение сечений бинодалей и расчет изопериодных составов (относительно автоматически отбираемых подложек) для твердых растворов типа $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$. Например, применительно к системе Ga-In-As-Sb, в которой образуются твердые растворы состава $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}$, на графике приводятся бинодальные и спинодальные кривые при конкретной температуре: расчетная бинодаль сравнивается с соответствующей спинодалью; показаны также ко-

ноты, соединяющие полученные расчетом точки равновесных составов. Линии изопериодных составов представлены для подложек соединений, входящих в состав четырехкомпонентного твердого раствора, т.е. GaAs, InSb и InAs, а также для GaSb (для наиболее распространенных подложек, помимо изопериодных составов, показываются расчетные составы, близкие к изопериодным, т.е. $\Delta a/a = \pm 0.1\%$). Координаты интересующих пользователя точек могут выводиться на дисплей активацией курсора «мыши» на соответствующей точке.

IV. Расчет кинетики жидкофазной эпитаксии

Построение зависимости толщины эпитаксиального слоя от времени роста.

V. Решение задач, связанных с неравновесными явлениями при гетероэпитаксии

1. Проверка растворимости двухкомпонентных подложек в насыщенных четырехкомпонентных жидких растворах при формировании гетероструктур типа $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}/AC(BD)$ и $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}/AC(BD)$.

2. Расчет величины исходного переохлаждения раствора, предотвращающего растворение подложек (для четырехкомпонентных систем).

3. Расчет состава жидкой фазы, обеспечивающего выбранный состав эпитаксиального слоя $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ ($A_xB_yC_{1-x-y}D$) при заданных температуре эпитаксии и величине исходного переохлаждения раствора.

4. Расчет зависимости состава эпитаксиального слоя $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ ($A_xB_yC_{1-x-y}D$) от величины исходного переохлаждения раствора при изотермической эпитаксии.

5. Расчет влияния упругих напряжений при формировании неизопериодных структур на смещение гетерогенных равновесий в системе.

6. Расчет критической толщины слоя при гетероэпитаксии, т.е. толщины эпитаксиального слоя, не приводящей к образованию дислокаций несоответствия.

Заключение

Разработана ИРС, позволяющая обеспечивать компьютерное моделирование процессов технологии полупроводниковых материалов и структур на основе соединений типа $A^{III}B^V$. База данных информационно-расчетной системы охватывает 9 соединений $A^{III}B^V$ и образуемые ими твердые растворы в 18 трехкомпонентных и 15 четырехкомпонентных системах. ИРС позволяет решать задачи, связанные с расчетом гетерогенных равновесий в трех- и четы-

рехкомпонентных системах, устойчивостью образующихся твердых растворов к распаду, кинетикой эпитаксиального роста гетероструктур, включающих твердые растворы на основе соединений типа $A^{III}B^V$, и неравновесными явлениями, сопровождающими гетероэпитаксию. ИРС может быть использована в исследовательской и в учебной практике.

Список литературы / References:

1. Guggenheim E.A. Mixtures. London: Oxford, 1952. 651 p.
2. Vialand L. J. // Acta Metallurgica, 1963. V. 11. № 2. P. 137–142.
3. Акчурин Р.Х., Берлинер Л.Б. Компьютерное моделирование процессов полупроводниковой технологии. I. Моделирование процесса жидкофазной эпитаксии: учебно-метод. пособие. М.: ИПЦ МИТХТ, 1998. 58 с.
4. Akchurin R.Kh., Berliner L.B. Komp'yuternoe modelirovanie processov poluprovodnikovoj tekhnologii. I. Modelirovanie processa zhidkofaznoj ehpitaksii: uchebno-metod. posobie. (Computer modeling of processes of semiconductor technology. I. Modeling of liquid-phase epitaxy process: textbook) M.: IPC MITHT, 1998. 58 p.
4. Jordan A. S., Ilegems M. // J. Phys. Chem. Solids. 1975. V. 36. № 2. P. 329–342.