

01;05;06;10

Теоретическое описание высокотемпературной имплантации карбида кремния ионами N^+ и Al^+

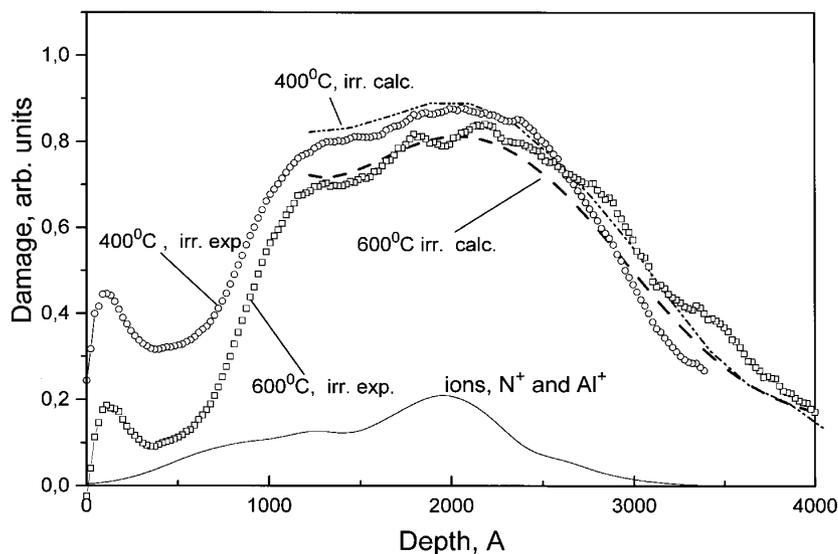
© Д.В. Куликов, Ю.В. Трушин, Р.А. Янков,
Й. Пецольт, В. Скорупа

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
С.-Петербург, Россия
Исследовательский центр Россендорф,
Дрезден, Германия
Технический университет Ильменау,
Ильменау, Германия

Поступило в Редакцию 28 августа 1997 г.

Теоретически исследовалась эволюция дефектной структуры в карбиде кремния ($6H-SiC$) при имплантации ионами N^+ и Al^+ разных энергий. Получено удовлетворительное согласие рассчитанных распределений дефектов и экспериментальных данных. Численно оценены следующие кинетические параметры карбида кремния: энергия миграции межузельных атомов кремния, параметры рекомбинации вакансий и межузлий в подсистемах углерода и кремния.

Квазибинарная система $(SiC)_{1-x}(AlN)_x$ представляют значительный интерес для создания новых оптоэлектронных и высокотемпературных приборов и является в настоящее время, пожалуй, наиболее перспективной для этих целей. Одним из способов создания такого твердого раствора является ионная имплантация карбида кремния. В работе [1] проведены экспериментальные исследования структуры образцов $(SiC)_{1-x}(AlN)_x$, полученных методом ионно-лучевого синтеза. Облучение ионами каждого образца производилось в следующем порядке. Сначала ионами азота с энергией 65 keV и дозой $5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$, а затем с энергией 120 keV дозой $1.3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$, потом ионами алюминия последовательно с энергией 100 keV дозой $5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ и с энергией 160 keV дозой $1.3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$. Температура подложек была 200, 400, 600 и 800°C. После имплантации образцы исследовались методом RBS/C, используя пучек ионов He^+ с энергией 1.4 meV, RBS-спектры



Сравнение экспериментальных RBS-профилей залегания дефектов [3] (irr. exp.) с рассчитанными суммарными распределениями дефектов (irr. calc.) (при учете диффузионных процессов) в облученных при температурах 400 и 600°C образцах SiC. Кривая "ions N⁺ and Al⁺" — рассчитанный по DYTRIRS суммарный баллистический профиль залегания ионов в SiC [2,3].

обрабатывались с помощью специально разработанной компьютерной программы, позволяющей получать распределения дефектов структуры по глубине (см. [2,3]). С использованием комплекса программ TRIRS и DYTRIRS [4–6] проведены расчеты баллистических распределений имплантированных ионов и дефектов. В работах [2,3] получены баллистические распределения ионов N⁺ и Al⁺ (DYTRIRS) (см. кривую "ions N⁺ and Al⁺" на рисунке и рис. 1, а из [3], кривая 1) и суммарные распределения дефектов (рис. 1, а из [3], кривая 2).

В соответствии с рис. 1, а из [3] и работой [2] для простоты описания происходящих физических изменений выделим в образце две большие области по глубине: $r < 120$ nm и $r > 120$ nm. Такое разбиение введено потому, что: 1) в области $r > 120$ nm распределения дефектов после облучения при температурах 400, 600, 800°C ведут себя

примерно одинаково: при $120 < r < 270$ nm зависимостью от r можно пренебречь; при $r > 270$ nm концентрация центров рассеяния RBS спадает практически одинаково для образцов, облученных при разных температурах; 2) в области $r < 120$ nm все три облученных образца ведут себя по-разному, что и отражается на распределениях дефектов.

Для описания процессов, происходящих при облучении SiC ионами Al^+ и N^+ при температурах 400, 600°C в области $r > 120$ nm, предложим следующую модель.¹

1. Ионы Al^+ и N^+ , взаимодействуя с кристаллической решеткой SiC, образуют межузлия (i) и вакансии (v) в обеих подсистемах материала (углерода — C и кремния — S) (относительные концентрации $C_{iC}(r, t)$, $C_{vC}(r, t)$, $C_{iS}(r, t)$, $C_{vS}(r, t)$ соответственно).

2. Имплантированные ионы Al^+ занимают вакансии и подрешетке кремния [7], а ионы N^+ — в подрешетке углерода [8] (относительная суммарная концентрация обоих ионов — $C(r, t)$).

3. В процессе облучения возможна диффузия межузельных атомов углерода (iC) и кремния (iS) и их рекомбинация со своими вакансиями (vC и vS).

4. Вакансии и имплантированные ионы считаются неподвижными, так как а) вакансии имеют большую энергию активации миграции (см. [9]); б) из сравнения рассчитанных по DYTRIRS [1–3] и экспериментальных профилей залегания ионов N^+ в SiC (см. рис. 1, б в [3]) видно, что эти ионы не диффундируют при используемых температурах (то же самое предполагаем для ионов Al^+).

5. Межузлия углерода (iC) и кремния (iS) образуют комплексы, состоящие из двух межузлий углерода или кремния (относительные концентрации $C_{2C}(r, t)$ и $C_{2S}(r, t)$).

На основе предположений (1)–(5) запишем систему балансных кинетических уравнений для вышеназванных концентраций точечных дефектов, зависящих от глубины r и времени t :

$$\frac{\partial C_{iC}(r, t)}{\partial t} = g_{iC}(r, t) - D_{iC} \Delta C_{iC}(r, t) - \mu_C D_{iC} C_{iC}(r, t) C_{vC}(r, t) - \alpha_{iC} D_{iC} C_{iC}^2(r, t), \quad (1)$$

¹ Образец, облученный при 800°C, не рассматриваем потому, что при исследовании с помощью электронной просвечивающей микроскопии (ТЕМ) в этом образце обнаружена особая микроструктура, отличная от образцов, облученных при других температурах, и пока не поддающаяся идентификации.

$$\frac{\partial C_{vC}(r,t)}{\partial t} = g_{vC}(r,t) - g_N(r,t) - \mu_C D_{iC} C_{iC}(r,t) C_{vC}(r,t), \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{iS}(r,t)}{\partial t} &= g_{iS}(r,t) - D_{iS} \Delta C_{iS}(r,t) \\ &\quad - \mu_S D_{iS} C_{iS}(r,t) C_{vS}(r,t) - \alpha_{iS} D_{iS} C_{iS}^2(r,t), \end{aligned} \quad (3)$$

$$\frac{\partial C_{vS}(r,t)}{\partial t} = g_{vS}(r,t) - g_{Al}(r,t) - \mu_S D_{iS} C_{iS}(r,t) C_{vS}(r,t), \quad (4)$$

$$\frac{\partial C_{2C}(r,t)}{\partial t} = \alpha_{iC} D_{iC} C_{iC}^2(r,t), \quad (5)$$

$$\frac{\partial C_{2S}(r,t)}{\partial t} = \alpha_{iS} D_{iS} C_{iS}^2(r,t), \quad (6)$$

$$\frac{\partial C(r,t)}{\partial t} = g_{N,Al}(r,t). \quad (7)$$

Здесь $g_l(r,t)$ — скорость генерации соответствующих дефектов ($l = iC, iS, vC, vS, Al, N$) при облучении $g_1(r,t) = JP_1(r)$, где $J = 6.24 \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ [1–3] — плотность потока падающих ионов, $P_1(r)$ — распределения дефектов 1 по глубине, созданных одним падающим ионом, определенные из расчетов по TRIRS [3] (суммарные профили для всех дефектов с учетом дозы и без учета рекомбинации приведены в [3] на рис. 1, а кривая 2); μ_λ — параметр рекомбинации вакансий и межузлий в подсистеме $\lambda = C, S$; $D_j = D_{0j} \exp(-\varepsilon_j^m/kT)$ и ε_j^m — коэффициент диффузии и энергия активации миграции межузельных атомов углерода или кремния ($j = iC, iS$), $\varepsilon_{iC}^m = 1.47 \text{ eV}$ [9], а поскольку величина ε_{iS}^m неизвестна из литературы, то она варьировалась в ходе расчетов; $D_{0j} = 10^{-3} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$; $\alpha_j \approx 4\pi a$ ($j = iC, iS$) — параметр образования комплексов соответствующих дефектов, где $a \approx 2 \text{ \AA}$ — среднее межатомное расстояние в SiC.

Поскольку в исходных (до облучения образцах) предполагается отсутствие дефектов, то начальные условия для концентраций будут $C_l(r,t)|_{t=0} = 0$, где $l = iC, iS, vC, vS, Al, N$.

Граничные условия для подвижных дефектов $j = iC, iS$ выбраны следующие:

1) $\left. \frac{\partial C_j(r,t)}{\partial r} \right|_{r=120 \text{ nm}} = 0$, т.е. предполагается отсутствие потока диффундирующих дефектов на границе $r = 120 \text{ nm}$. Такое условие выбрано потому, что, исходя из характера концентрационных профилей для

температур облучения 400, 600, 800°C при $r < 120$ nm, можно полагать, что они определяются в основном рекомбинацией вакансий и межузлий. Об этом свидетельствует величина минимума концентрации при 800°C, равная значению концентрации имплантированных ионов (см. рис. 1, *a* в [3]). Если предположить, что в эту область могут диффундировать дефекты из более глубоких слоев материала, то концентрация собственных дефектов не достигала бы нуля.

2) $C_j(r, t)|_{r=\infty} = 0$ — равенство нулю концентраций дефектов $j = iC, iS$ на бесконечной глубине.

Система уравнений (1)–(7), описывающая эволюцию дефектов в SiC, при облучении при температурах 400, 600°C решалось численно на компьютере IBM PC с помощью программы MGEAR [10].

В результате расчетов получены распределения концентраций указанных дефектов после облучения при 400, 600°C, представленные на рисунке в сравнении с профилями, рассчитанными из RBS-данных (см. [3]). Видно, что теоретические результаты удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными. Наблюдается некоторое отличие расчетов и экспериментальных результатов при $120 \text{ nm} < r < 200 \text{ nm}$. Это может быть связано с тем, что в этой зоне существенную роль начинают играть процессы, характерные для приповерхностной области ($r < 120 \text{ nm}$), которую мы не рассматриваем.

В ходе расчетов варьировались некоторые кинетические параметры, используемые в уравнениях (1)–(7). Наилучшее согласие расчетных и экспериментальных профилей получено при следующих значениях этих параметров:

- энергия активации миграции межузельных атомов кремния $\varepsilon_{iS}^m \approx 1.55 \text{ eV}$,
- параметры рекомбинации для C и Si $\mu_C \approx 4\pi \cdot 10^{-12} \text{ cm}$, $\mu_S \approx 4\pi \cdot 10^{-10} \text{ cm}$.

Кроме того, в ходе расчетов выяснилось, что необходимо ограничение концентрации комплексов $C_k(r, t) < 0.2$ ($k = 2C, 2S$).

Таким образом, в настоящей работе предложена физическая модель эволюции дефектной структуры в 6H-SiC при имплантации ионами N^+ и Al^+ для глубин залегания дефектов $r > 120 \text{ nm}$ и рассчитаны распределения дефектов в материале при $r > 120 \text{ nm}$. Получено удовлетворительное согласие расчетных результатов и экспериментальных данных. В ходе расчетов проведена численная оценка некоторых кинетических параметров карбида кремния.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, грант № 97-02-18110 и грантом поддержки ведущих научных школ РФ № 96-15-96348.

Список литературы

- [1] *Yankov R.A., Hatzopoulos N., Fukarek W., Voelskow M., Hera V., Pezoldt J., Skorupa W.* // *Mat. Res. Symp. Proc.* 1997. V. 438. P. 271-276.
- [2] *Kharlamov V.S., Kulikov D.V., Trushin Yu.V., Tsigankov D.N., Yankov R.A., Voelskow M., Skorupa W., Pezoldt J.* // *International Workshop on New Approaches to Hi-tech Materials 97 (Nondestructive Testing and Computer Simulations in Materials Science and Engineering). Program and Abstracts.* 9-12 June 1997. St. Petersburg, Russia. C2-13.
- [3] *Янков Р.А., Фёльсков М., Крайссиг У., Куликов Д.В., Пецольдт Й., Скорупа В., Трушин Ю.В., Харламов В.С., Циганков Д.Н.* // *Письма в ЖТФ.* 1997. Т. 23. В. 6. С. 6-14.
- [4] *Ber B.J., Merkulov A.V., Kharlamov V.S., Trushin Yu.V., Zhurkin E.E.* // *Tech. Phys.* 1996. V. 41. N 3. P. 261-267.
- [5] *Trushin Yu.V., Ber B.J., Kharlamov V.S., Zhurkin E.E.* // *J. Nucl. Mater.* 1996. V. 233/237. P. 991-995.
- [6] *Ber B.J., Kharlamov V.S., Trushin Yu.V., Merkulov A.V., Zhurkin E.E.* // *Proc. 10th Int. Conf. on Ion Beam Modification of Materials.* Sept. 1-6, 1996. Albuquerque, New Mexico, USA. Tu29.
- [7] *Choyke W.J., Pens G.* // *MRS Bulletin.* March 1997. P. 25.
- [8] *Tsvetkov V.F., Allen S.T., Kong H.C., Carter C.H., jr.* // *Proc. 6th Int. Conf. on Silicon Carbide and Related Materials, 1995* / Ed. by S. Nashikama, S. Yoshida, and H. Harima (Institute of Physics Conference Series. N 142. 1996). P. 17.
- [9] *Huang H., Ghonien N.* // *J. Nucl. Mater.* 1994. V. 212-215. P. 148-153.
- [10] *Kulikov D.V., Suris R.A., Trushin Yu.V.* // *Supercond. Sci.&Techn.* 1995. V. 8. P. 303.