

# Исследование переходного слоя в гетероструктурах 3C-SiC/6H-SiC

© А.А. Лебедев, М.В. Заморянская, С.Ю. Давыдов, Д.А. Кириленко, С.П. Лебедев,  
Л.М. Сорокин, Д.Б. Шустов, М.П. Щеглов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 3 апреля 2013 г. Принята к печати 16 апреля 2013 г.)

Методами ТЕМ и катодоллюминесценции проведено исследование переходной области гетероструктур 3C-SiC/6H-SiC. Обнаружено, что данная область, как правило, состоит из чередования слоев 3C-SiC и 6H-SiC с возможным включением и других политипов карбида кремния. Высказано предположение, что подобная структура переходной области может быть объяснена на основе модели спинодального распада.

## 1. Введение

Известно, что карбид кремния (SiC) является перспективным материалом для создания силовых и высокочастотных приборов, способных работать при повышенных температурах окружающей среды и высоких уровнях ионизирующего излучения. Уникальной особенностью карбида кремния является политипизм, т. е. возможность кристаллизоваться в различных модификациях. Политипы SiC, имея одинаковую химическую природу, могут значительно отличаться по своим электрофизическим параметрам. Так, например, разница в величинах ширины запрещенных зон для политипов 2H-SiC и 3C-SiC составляет порядка 1 эВ. Это делает карбид кремния весьма перспективным материалом с точки зрения создания различных типов гетероструктур [1], в том числе и транзисторов НЕМТ [2].

Наиболее интенсивно изучаются гетеропереходы между кубическим политипом карбида кремния (3C-SiC) и одним из гексагональных (nH-SiC). Ранее уже были сообщения о получении двумерного электронного газа на границе 4H-3C [3], но транзисторы НЕМТ до сих пор не созданы. По-видимому, это связано с недостаточной изученностью процесса трансформации политипов и наличием переходной области между 3C-SiC и nH-SiC. В последние годы появился целый ряд работ, где проводятся исследования данной области и сообщается о ее сложной кристаллической структуре [4–9].

Таким образом, задачей настоящей работы было исследование переходной области в гетероструктурах 3C-SiC/6H-SiC, полученных методом сублимационной эпитаксии, анализ причин ее возникновения и оценка возможности уменьшения ее толщины.

## 2. Эксперимент

### 2.1. Технология

Эпитаксиальные слои 3C-SiC были выращены методом сублимационной эпитаксии в вакууме. Источником роста служил высокочистый мелкозернистый порошок SiC. Для удаления нарушенного поверхностного слоя

подложки SiC перед ростом были подвергнуты „*in situ*“ сублимационному полирующему травлению.

В качестве подложек использовались on-axis полированные пластины 6H-SiC. Рост происходил на Si (0001) или C (0001) гранях. Рост проводился в диапазоне температур 1800–2000°C, время роста составило 15 мин. Экспериментально было установлено, что для получения слоя 3C-SiC на более чем 95% площади подложки для Si- и C-граней необходимы различные условия роста. Рост 3C-SiC на Si-границе происходил при температурах около 2000°C со скоростью более 0.7 мкм/мин. Рост на C-границе — при температурах 1850–1900°C со скоростью 0.4–0.5 мкм/мин. Толщина выращенного эпитаксиального слоя составляла ~ 7–10 мкм.

### 2.2. Структурные исследования

Качество выращенного 3C-SiC слоя контролировалось методами фотолюминесценции и рентгеновской дифракции. Рентгеновская топограмма структуры выращенного слоя 3C-SiC представлена на рис. 1. Топограмма получена в рефлексе (311)<sub>CuKa1</sub> для 3C-политипа. Изобра-

PSS-62 (311)-3C

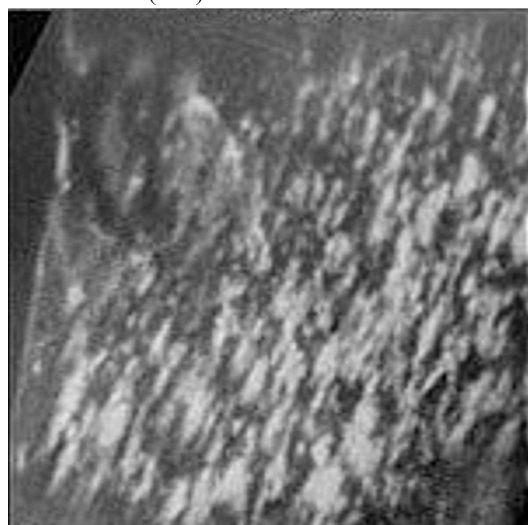


Рис. 1. Рентгеновская топограмма.

† E-mail: shura.lebe@mail.ioffe.ru

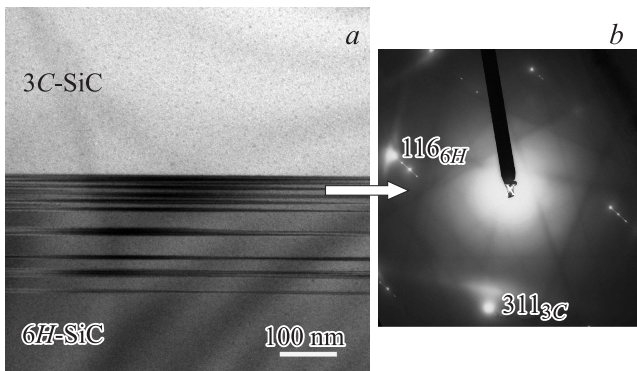


Рис. 2. *a* — ТЕМ изображение переходного слоя; *b* — микродифракционное изображение интерфейса 3C/6H.

жение сформировано неравномерно распределенной полосчатой ячеистой структурой слоя, толщина которого несколько различается по поверхности подложки.

Проведенные исследования показали, что эпитаксиальные слои, выращенные на C-границе, обладают большим структурным совершенством, чем выращенные на Si-границе, и меньшим количеством включений политипа 6H-SiC. Полуширина рентгеновской кривой качания (FWHMs) для эпитаксиального слоя 3C-SiC, выращенного на Si- и C-гранях, составляла 130 и 60 arcsec, соответственно [10].

В качестве основного метода для исследования структуры интерфейс 3C/6H был выбран метод просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Для ПЭМ исследования были использованы микроскопы JEOL JEM-2100F и Philips EM-420 с ускоряющим напряжением 200 и 100 кВ соответственно. С помощью ПЭМ было обнаружено наличие переходного слоя (ПС) между гексагональной подложкой и кубическим эпитаксиальным слоем. В обоих случаях (для Si- и C-граней), переходный слой (ПС) имеет одну и ту же структуру и толщину (около 400–600 нм). Подробное ПЭМ изображение 3C/6H интерфейса представлено на рис. 2. Как видно из рисунка, ПС состоит из чередующихся слоев 3C и 6H, без включений других политипов.

### 2.3. Католюминесценция

Для оценки степени однородности эпитаксиального слоя, выявления на разных его глубинах и идентификации включений использовался метод локальной католюминесценции (КЛ). КЛ исследования также дают возможность локально идентифицировать структурную модификацию эпитаксиального слоя и возможных включений в нем по спектрам излучения. Локальность метода составляет 1–5 мкм в латеральном направлении, что дает возможность обнаруживать и идентифицировать включения различной модификации, точечные и протяженные дефекты, например дефекты упаковки (SF), являющиеся центрами люминесценции.

Для удобства исследования ПС методом КЛ у образцов была косо сошлифована часть структуры вблизи границы эпитаксиального слоя, как это показано на рис. 3. КЛ изображение переходного слоя представлено на рис. 4.

Политип исследуемой области может быть определен по спектру КЛ, не только по излучательным переходам в области зона-зона, но и по положению полос люминесценции дефектов. Все излучение, связанное с люминесценцией дефектов, сдвигается по спектру вместе с положением запрещенной зоны. Таким образом, для 3C-SiC ( $E_g = 2.36$  эВ) наблюдается сдвиг максимума люминесценции в красную область, по сравнению с 6H-SiC ( $E_g = 3.00$  эВ). Основная доля излучения 3C-политипа приходится на красную область (максимум 2.0–2.1 эВ), а максимум излучения 6H-SiC наблюдается в синем диапазоне излучения (2.6 эВ). Таким образом, по цветовому контрасту на КЛ изображении можно судить о политипе локальной области.

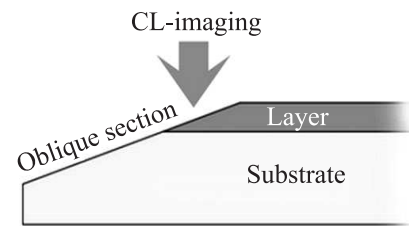


Рис. 3. Схематическое изображение (не в масштабе) среза образца. КЛ изображения были получены в планарной плоскости.

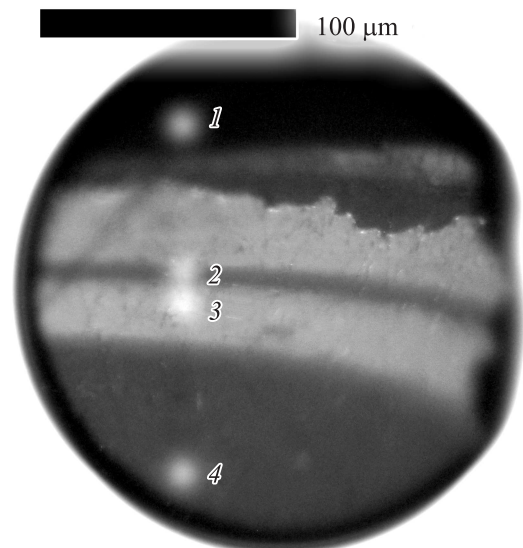
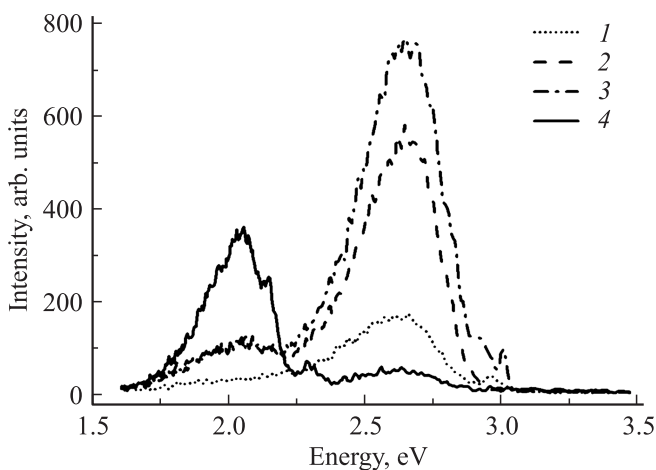
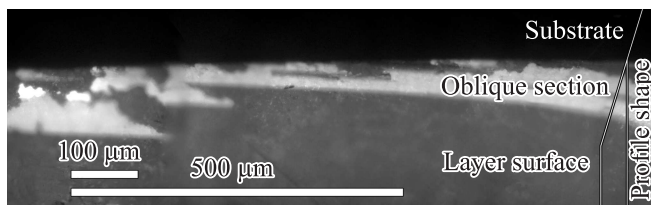


Рис. 4. Область косо шлифа (планарная ориентация). Темная область сверху — подложка, однородная люминесценция снизу — поверхность выращенного слоя. Между ними — область косо шлифа, где латеральное положение соотносится с глубиной. Светлые области — голубая люминесценция 4H-SiC. Темно-серые области — красная люминесценция 3C-SiC, черная область сверху — подложка.



**Рис. 5.** Спектры полученные в области косо́го шлифа, в точках, обозначенных на рис. 4: 1 — подложка; 2 — прослойка 3C-политипа; 3 — прослойка 4H-политипа; 4 — поверхность выращенной 3C-пленки.



**Рис. 6.** Общий план показывающий протяженную область в районе косо́го шлифа. Сверху — подложка, снизу — выращенная пленка, между ними — косо́й шлиф — срез по глубине пленки. Светлые области — голубая люминесценция 4H-SiC. Темно-серые области — красная люминесценция 3C-SiC, черная область вверху — подложка. Белые вкрапления — зеленые области скопления дефектов.

На рис. 5 представлены спектры КЛ, зарегистрированные для различных областей ПС, изображенного на рис. 4. Как видно из рисунка, для структуры ПС наблюдается такое же чередование полос различных политипов, которое наблюдалось и по данным ПЭМ, причем на большем диапазоне размеров.

На рис. 6 показан общий вид края образца. Видно, что отдельные вкрапления политипов имеют большие латеральные размеры, до нескольких сотен микрон.

### 3. Обсуждения результатов

ПС с чередованием полос различных политипов SiC наблюдались и в работах других авторов [5,6]. Предполагалось, что зарождение островков 3C-SiC происходило в разных областях подложки 6H-SiC и на разных этапах роста эпитаксиального слоя. При этом в других местах подложки происходил рост пленки 6H-SiC, на поверхности которой также происходило образование островков 3C-SiC. В конечном итоге вся поверхность подложки

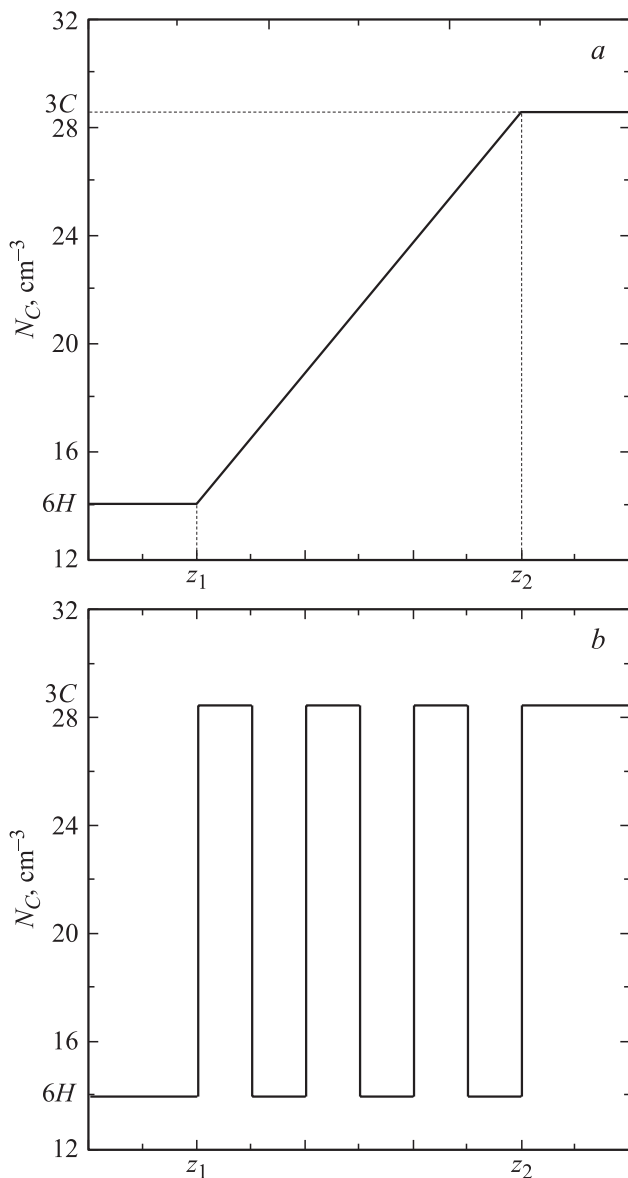
покрывалась эпитаксиальным слоем 3C-SiC, при этом на сколе образца в направлении, перпендикулярном поверхности подложки, наблюдалось чередование прослоек 6H и 3C.

Нам представляется, что подобная модель достаточно хорошо объясняет чередование областей различных политипов на характерных размерах  $\sim 100$  нм. В то же время, как видно из рис. 6, подобная структура ПС сохраняется и на гораздо больших масштабах порядка нескольких мм. Неясно, почему выросший практически по всей площади подложки эпитаксиальный слой 3C сменяется слоем 6H, а затем снова слоем 3C.

В настоящей работе делается попытка дополнить ранее предложенную модель, прибегнув к концепции спиноподобного распада.

При быстром протекании фазового перехода одна (или обе) из сосуществующих фаз оказываются неустойчивыми. При этом может произойти спиноподобный распад системы, сопровождающийся усилением случайных неоднородностей концентрации частиц [11]. Тогда оказывается возможным появление модулированных по плотности релаксационных структур. Такие переходы имеют место для полупроводниковых систем, где сосуществуют две фазы, отличающиеся своими химическими компонентами (атомами) [12,13]. В рассматриваемой здесь ситуации фазы химически одинаковы, но обладают разной структурой и, что для применимости концепции спиноподобного распада особенно важно, различной концентрацией вакансий. Действительно, 3C-политип характеризуется концентрациями вакансий  $N_C^{3C} = 28.5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ ,  $N_{\text{Si}}^{3C} = 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ , 6H-политип — концентрациями  $N_C^{6H} = 14 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ ,  $N_{\text{Si}}^{6H} = 4 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$  (нижний индекс указывает подрешетку, в которой имеются вакансии) [14]. Далее мы будем рассматривать модуляционную структуру, фазы которой отличаются именно содержанием вакансий. Вакансионная теория гетерополитипной эпитаксии была предложена нами в работах [15,16]. Здесь, однако, мы применим упрощенный подход, аналогичный подходу, развитому в [17] для описания аннигиляции микротрубок в эпитаксиальных слоях SiC.

Будем рассматривать рост 3C-политипа на 6H-субстрате, отслеживая концентрацию только углеродных вакансий, которая в этом процессе возрастает от  $N_C^{6H}$  до  $N_C^{3C}$ . Как и в [17], считаем, для простоты, процесс линейным по времени. Введем скорость роста эпитаксиального слоя  $G$  и толщину переходного слоя  $a$ . Тогда время, за которое этот слой образуется, есть  $t^* = a/G$ , а средняя скорость генерации вакансий равна  $v_{\text{gen}} = (N_C^{3C} - N_C^{6H})aS/t^*$ , где  $S$  — площадь межфазной границы (интерфейса). Предположим, что в процессе эпитаксии генерация вакансий идет с постоянной скоростью  $v_{\text{gen}}$ , так что концентрация углеродных вакансий в переходном слое  $N_C(z)$  растет линейно, как это изображено на рис. 7,  $a$  (здесь ось  $z$  направлена вдоль гексагональной оси  $c$ ,  $a = z_2 - z_1$ ). Такое распределение



**Рис. 7.** Изменение концентрации углеродных вакансий вдоль оси  $c[0001]$ , соответствующее неустойчивому (а) и устойчивому (b) состояниям системы.  $(z_2 - z_1)$  — переходный слой между 6H- и 3C-политипами.

вакансий будем считать неустойчивым. Поэтому предположим, что в переходном слое происходит спинодальный распад, и картина распределения вакансий принимает вид, изображенный на рис. 7, b. Не вдаваясь на данном этапе в детали механизма такого распада, проанализируем его последствия.

Пусть в процессе спинодального распада число вакансий в переходном слое равно

$$M_C = (N_C^{3C} + N_C^{6H})aS/2. \tag{1}$$

Если считать, что в результате распада появляются  $n_1$  6H-областей и  $n_2$  3C-областей, обладающих соответственно ширинами  $a_1$  и  $a_2$ , то из условия сохранения

числа вакансий получим

$$n_1 a_1 N_C^{6H} + n_2 a_2 N_C^{3C} = \frac{1}{2} a (N_C^{6H} + N_C^{3C}), \tag{2}$$

причем  $n_1 a_1 + n_2 a_2 = a$ . Если области отдельных политипов имеют разброс толщин ( $a_{1i}$  и  $a_{2i}$ ), то уравнение (2) принимает вид

$$\tilde{a}_1 N_C^{6H} + \tilde{a}_2 N_C^{3C} = \frac{1}{2} a (N_C^{6H} + N_C^{3C}), \tag{3}$$

где  $\tilde{a}_1 + \tilde{a}_2 = a$ ,  $\tilde{a}_{1,2} = \sum_i a_{1,2i}$  — суммарные толщины 6H- и 3C-областей в переходном слое. Подставляя сюда значения  $N_C^{6H,3C}$ , получим для долей  $\alpha_{1,2} = \tilde{a}_{1,2}/a$  („удельных весов“) 6H- и 3C-политипов в переходном слое решение вида  $\alpha_1 = \alpha_2 = 0.5$ . Таким образом, половину переходного слоя должен занимать политип 6H, половину — 3C, причем этот результат является следствием линейного хода  $N_C(z)$  и в рамках данной (сильно упрощенной) модели справедлив для переходного слоя между любыми двумя политипами.

Отметим, что в нашем рассмотрении не учитывается роль возникающих межфазных границ. Более того, за скобки вынесен вопрос — почему при переходе от 6H-к 3C-политипу не происходит образования значительных включений 8H-SiC. В данном политипе равновесная концентрация вакансий ( $N_C^{8H}$ ) равна  $N_C^{8H} = 16.6 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ ,  $N_{Si}^{8H} = 3 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ , т.е.  $N_C^{6H} < N_C^{8H} < N_C^{3C}$ .

Очевидно, что толщина переходного слоя будет зависеть от того, насколько быстро в зоне роста будет создана равновесная для образующегося политипа концентрация вакансий, т.е. от скорости генерации вакансий  $v_{gen}$ . Так как  $v_{gen} \propto \exp(-E_v/k_B T)$ , где  $E_v$  — энергия образования поверхностной вакансии, то ясно, что с ростом температуры можно добиться уменьшения толщины ПС. По-видимому, существуют и другие технологические параметры, при которых толщина ПС будет практически равна нулю, как это было экспериментально обнаружено в гетероструктурах, полученных сублимацией [18] и CVD [3].

#### 4. Заключение

Исследование гетероструктур 3C-SiC/6H-SiC показало наличие переходного слоя на гетерогранице, состоящего из прослоек обоих политипов. Показано, что подобная структура, по-видимому, может быть объяснена на основе модели спинодального распада и развитой ранее вакансионной модели трансформации политипов. В дальнейшем представляется интересным оценить как возможность создания гетероструктуры без ПС, так с и ПС, состоящим из системы нанопрослоек (квантовых ям) 3C и 6H.

Данная работа частично выполнена при поддержке гранта РФФИ № 11-02-00662а.



## Список литературы

- [1] A.A. Lebedev. *Semicond. Sci. Technol.*, **21**, R17 (2006).
- [2] V.M. Polyakov, F. Schwier. *J. Appl. Phys.*, **98**, 023 709 (2005).
- [3] M.V.S. Chandrashekar, C.I. Thomas, J. Lu, M.G. Spencer. *Appl. Phys. Lett.*, **91**, 033 503 (2007).
- [4] O. Kim-Hak, G. Ferro, J. Dazord, M. Marinova, J. Lorenzzi, E. Polychroniadis, P. Chaudouet, D. Chaussende, P. Miele. *J. Cryst. Growth*, **311**, 2385 (2009).
- [5] R. Vasiliauskas, M. Syvajarvi, M. Beskova, R. Yakimova. *Mater. Sci. Forum*, **615–617**, 189 (2009).
- [6] R. Vasiliauskas, M. Marinova, M. Syväjärvi, A. Mantzari, A. Andreadou, J. Lorenzzi, G. Ferro, E. K. Polychroniadis, R. Yakimova. *Mater. Sci. Forum*, **645–648**, 175 (2010).
- [7] R. Vasiliauskas, M. Marinova, P. Hens, P. Wellmann, M. Syväjärvi, R. Yakimova. *J. Cryst. Growth*, **12**, 197 (2012).
- [8] K. Seki, S. Kozawa, T. Ujihara, Y. Takeda. *J. Cryst. Growth*, **360**, 176 (2012).
- [9] R. Vasiliauskas, S. Juillaguet, M. Syväjärvi, R. Yakimova. *J. Cryst. Growth*, **348**, 91 (2012).
- [10] S.P. Lebedev, A.A. Lebedev, A.A. Sitnikova, D.A. Kirilenko, N.V. Sereдова, A.S. Tregubova, M.P. Scheglov. *Mater. Sci. Forum*, **740–742**, 137 (2013).
- [11] В.П. Скрипов, А.В. Скрипов. *УФН*, **128**, 193 (1979).
- [12] Н.А. Берт, Л.С. Вавилова, И.П. Ипатова, В.А. Капитонов, А.В. Мурашова, Н.А. Пихтин, А.А. Ситникова, И.С. Тарасов, В.А. Шукин. *ФТП*, **33** (5), 544 (1999).
- [13] А.Ю. Маслов, О.В. Прошин. *ФТП*, **43**, 873 (2009).
- [14] А.А. Лебедев. *ФТП*, **33**, 769 (1999).
- [15] А.А. Лебедев, С.Ю. Давыдов. *ФТП*, **39**, 296 (2005).
- [16] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев. *ФТП*, **41**, 641 (2007).
- [17] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев. *ФТП*, **45**, 743 (2011).
- [18] A.A. Lebedev, A.M. Strel'chuk, D.V. Davydov, N.S. Savkina, A.S. Tregubova, A.N. Kuznetsov, V.A. Soloviev, N.K. Poletaev. *Appl. Surf. Sci.*, **184**, 421 (2001).

Редактор Т.А. Полянская

## The study of the transition layer in the heterostructures 3C-SiC/6H-SiC

A.A. Lebedev, M.V. Zamorianskaya, S.Yu. Davydov,  
D.A. Kirilenko, S.P. Lebedev, L.M. Sorokin,  
D.B. Shustov, M.P. Scheglov

Physicotechnical Institute,  
Russian Academy of Sciences,  
194021 St. Petersburg, Russia

**Abstract** TEM methods and cathodoluminescence study of the transition region heterostructures 3C-SiC/6H-SiC. It was found that this area usually consists of alternating layers of 3C-SiC and 6H-SiC possibly including other polytypes of silicon carbide. The idea is put forward that such a structure of the transition layer can be considered on the basis of the spinodal decomposition model.