

01:05

Физическая модель перехода от гексагональной структуры к кубической в процессе роста нитрида бора при облучении ионами азота и аргона

© Ю.В. Трушин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург

Поступило в Редакцию 17 января 1997 г.

Предлагается модель, основанная на оригинальных экспериментальных данных и описывающая переход структуры при росте слоев нитрида бора от гексагональной к кубической. Полагается, что ионы бора и азота, поступающие в растущий слой, формируют дополнительные атомные плоскости, параллельные плоскостям (ab) гексагональной структуры, или достраивают имеющиеся в растущем кристалле дислокации, что и приводит к переходу нитрида бора в кубическую структуру.

Из экспериментов [1–3], в процессе роста тонких слоев нитрида бора (BN) путем ионного осаждения при облучении ионами N_2^+ и Ar^+ с энергией от 0.5 до 1.5 КэВ, гексагональный BN на подложке кремния растет таким образом, что ось c параллельна поверхности. При таком воздействии в растущий материал поступают ионы азота, а бор "вбивается" при взаимодействии атмосферы бора с ионами Ar^+ у поверхности растущего образца. В результате наблюдается переход гексагонального нитрида бора (h -BN) в кубический (c -BN).

Рассмотрим физическую модель перехода от гексагональной структуры BN к кубической в процессе роста слоев h -BN при облучении образца ионами азота и аргона. Предположим, что:

1) ионы азота и бора, поступающие в h -BN, при облучении оказываются в виде межузельных атомов (iN , iB) и располагаются между плоскостями (ab) в гексагональном BN.

2) межузельные атомы iN и iB диффундируют как на внешний сток (поверхность, Λ), так и на внутренние стоки, например дислокации (D), которые всегда есть в растущих кристаллах.

3) подвижные атомы азота и бора (iN , iB) могут образовывать молекулы BN , которые будут зародышами новых дополнительных плоскостей нитрида бора между существующими плоскостями (ab) в гексагональной структуре.

Для концентраций межузельных атомов азота и бора (C_{iN} , C_{iB}) и имплантированного аргона (C_{Ar}) запишем следующие уравнения:

$$\frac{\partial C_{iN}(r, t)}{\partial t} = g_{iN}^h(E, r, t) + \text{div}J_{iN}(r, t) - \alpha_{BN}(D_{iN} + D_{iB})C_{iN}C_{iB} - D_{iN}C_{iN}(S_D + S_F + S_\Lambda), \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_{iB}(r, t)}{\partial t} = g_{iB}^h(E_{Ar}, r, t) + \text{div}J_{iB}(r, t) - \alpha_{BN}(D_{iN} + D_{iB})C_{iN}C_{iB} - D_{iB}C_{iB}(S_D + S_F + S_\Lambda), \quad (2)$$

$$\frac{\partial C_{Ar}(r, t)}{\partial t} = g_{Ar}^h(E_{Ar}, r, t) + \text{div}J_{Ar}(r, t) - D_{Ar}C_{Ar}S_\Lambda. \quad (3)$$

Здесь: $g_j^h(E, r, t)$ — скорость генерации межузельных атомов азота и бора, а также аргона ($j = iN, iB, Ar$) в h - BN ; E и E_{Ar} — энергии падающих ионов азота и аргона соответственно; $J_j(r, t)$ — плотность потока частиц j в точке r в момент времени t ; $S_D + S_F, S_\Lambda$ — силы внутренних стоков (D — дислокаций и F — новых дополнительных плоскостей BN вдоль направлений c) и внешнего стока (Λ)—поверхности; D_j — коэффициент диффузии носителя $j = iN, iB, Ar$; $\alpha_{BN} = 4\pi l_{BN}$, где l_{BN} — расстояние захвата B и N для образования молекулы BN .

Баланс частиц (B, N, Ar) в материале (h - BN) для единицы объема в момент времени t можно записать следующим образом:

$$\rho_{nc}(t) = \rho_{nc}^h + C_{iB}(t) + C_{iN}(t) + C_{Ar}(t) + N_F(t) + N_D(t). \quad (4)$$

При этом $C_j(t)$ — средняя объемная концентрация, где $j = iN, iB, Ar$; $\rho_{nc}(t)$ — ядерная плотность материала к моменту времени t ; ρ_{nc}^h — ядерная плотность гексагонального BN ; $N_F(t)$ — число атомов N и B в 1 см^3 , которые образовали дополнительные плоскости F в h - BN к моменту времени t ; $N_D(t)$ — число атомов N и B в 1 см^3 , ушедших ко времени t на внутренние стоки в виде дислокаций.

Пусть время t_1 — время роста гексагонального BN в экспериментах [1–3] (примерно 30 мин). Тогда к этому моменту времени имеем:

$$а) \rho_{nc}^h(t_1) = \rho_{nc}^c \text{ (ядерная плотность кубического BN),}$$

б) $C_{Ar}(t_1) = 4\% \rho_{nc}^h$ (см. [3]),

в) $C_{iN}(t_1) = C_{iB}(t_1) = 0$ (все подвижные атомы азота и бора находятся только на стоках).

Используя (4) и условия (5), получим

$$\rho_{nc}^c - 0.96 \rho_{nc}^h = N_F(t_1) + N_D(t_1). \quad (6)$$

Для величин $N_F(t)$ и $N_D(t)$ можно записать следующие выражения (см. [4–6]):

$$N_F(t) = S_F \int_{t_0}^t [D_{iN} C_{iN}(t') + D_{iB} C_{iB}(t')] dt', \quad (7)$$

$$N_D(t) = S_D \int_{t_0}^t [D_{iN} C_{iN}(t') + D_{iB} C_{iB}(t')] dt', \quad (8)$$

где t_0 — время начала роста гексагонального ВН. Для сил внутренних стоков можно записать (см., например, [4–6])

$$S_D = \alpha_D \rho_D, \quad S_F = \alpha_F C_F R_F, \quad (9)$$

где ρ_D — плотность дислокаций; C_F и R_F — концентрация и средний ”радиус” (в адиабатическом приближении, см. [6–8]) дополнительных новых фрагментов плоскостей F в h -ВН; α_D и α_F — адсорбционные параметры для дислокаций и новых плоскостей (порядка ≈ 1).

Для оценки суммарной силы внутренних стоков ($S_D + S_F$) и внешних стоков S_Λ предположим, что межузельные атомы азота и бора (iN , iB) имеют одинаковые энергии активации миграции $\varepsilon_{iN}^m = \varepsilon_{iB}^m \approx 0.1$ эВ, а значит и примерно одинаковые коэффициенты диффузии $D_{iN} = D_{iB} = D$. Тогда и средние концентрации $C_{iB}(t) = C_{iN}(t) = C(t)$ и, следовательно, выражения (7) и (8) имеют вид

$$N_F(t) \approx 2DS_F \int_{t_0}^t C(t') dt', \quad N_D(t) \approx 2DS_D \int_{t_0}^t C(t') dt'. \quad (10)$$

Решая уравнение (3) для средней концентрации ионов аргона с учетом экспериментального значения их скорости генерации [3] и условия (5.б),

можно получить оценку для силы стока поверхности в виде

$$S_{\Lambda} \approx 4 \cdot 10^2 / \omega \approx 4 \cdot 10^{n+2} \text{ см}^{-2}, \quad (11)$$

где $\omega \approx 10^{-n}$ — вероятность передачи энергии от ионов аргона атомам бора ($n > 1$).

Из уравнений (1) и (2), также для средних по объему концентраций, с учетом (4) и (10) для момента времени t_1 можно получить:

$$N_F(t_1) + N_D(t_1) \approx 2g^h \Delta t \frac{S_D + S_F}{S_D + S_F + S_{\Lambda}}. \quad (12)$$

Используя условие (6), из выражения (12) имеем

$$S_D + S_F \approx 1.43 \cdot 10^{-3} S_{\Lambda}, \quad (13)$$

а с учетом (11) получим

$$S_D + S_F \approx 6 \cdot 10^{n-1}. \quad (14)$$

Следует заметить, что величина показателя n не слишком велика, поэтому, например, (см. выражение (9)) и плотность дислокаций в растущем образце также не будет слишком большой, что, в частности, известно из электронно-микроскопических исследований при выращивании аналогичными методами слоев SiC.

Таким образом, в заметке показано, что, предполагая образование в растущих слоях гексагонального нитрида бора возникновение дополнительных атомных плоскостей между имеющимися (ab) -плоскостями вдоль оси c , образующихся в процессе роста при облучении ионами азота и аргона в атмосфере бора, возможно соблюсти физические условия, вытекающие из баланса частиц, падающих на поверхность сначала гексагонального, а затем кубического BN. Формирующиеся новые дополнительные плоскости и приводят к постепенному переходу h -BN в c -BN за счет изменения межатомных расстояний в растущем нитриде бора. Приведенные результаты являются оценочными, качественно показывающими работоспособность сформулированной физической модели. Следующим этапом будет расчет пространственных распределений подвижных атомов азота и бора в режиме роста h -BN при соблюдении условия (4).

Автор благодарит сотрудников Исследовательского центра Россендорф (ФРГ) проф. Мёллера, д-ра А. Колитша, д-ра В. Фукарека и М. Пласса за предоставление экспериментальных данных и плодотворные обсуждения.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда фундаментальных исследований, грант N 96-02-17952.

Список литературы

- [1] *Plass M.F., Fukarek W., Kolitsch A., Kreissig U.* Surface and Coatings Technology. 1996. V. 84. P. 383–387.
- [2] *Plass M.F., Fukarek W., Kolitsch A., Mader M., Möller W.* // Phys. Stat. Sol. (A). 1996. 155. K1.
- [3] *Plass M.F., Fukarek W., Mandl S., Möller W.* // Appl. Phys. Lett. 1996. V. 69. P. 46.
- [4] *Trushin Yu.V.* // J. Nucl. Mater. 1991. V. 185. P. 279–285.
- [5] *Trushin Yu.V.* // Technical Physics. 1993. V. 39. P. 564–568.
- [6] *Trushin Yu.V.* // Theory of Radiation Processes in Metal Solid Solutions. Nova Science Publishers Inc., New York, USA, 1996. 405 p.