

01;05;10;12

Физическая модель эволюции дефектной системы карбида кремния с учетом внутренних полей упругих напряжений при имплантации ионами Al^+ и N^+ и последующем отжиге

© Д.В. Куликов, Ю.В. Трушин, П.В. Рыбин, В.С. Харламов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 20 ноября 1998 г. В окончательной редакции 30 апреля 1999 г.)

Предполагается теоретическое рассмотрение образования и развития дефектов в карбиде кремния, имплантированном ионами азота и алюминия, а затем отожженного. Учитываются диффузия дефектов, комплексообразование, влияние внутренних полей упругих напряжений, созданных имплантированными ионами и образовавшимися комплексами, на миграцию межузлий. Получено удовлетворительное согласие расчетных распределений дефектов с экспериментальными данными. Численно оценены некоторые кинетические параметры карбида кремния.

Введение

Карбид кремния (SiC) и материалы на его основе являются перспективными для мощной высокочастотной электроники. SiC является широкозонным полупроводником, который может найти свое применение в электронных приборах, действующих в условиях высокой температуры, жесткого облучения, агрессивной окружающей среды [1–5]. Перспективы использования карбида кремния были открыты еще в 50-х и 60-х годах [6]. Однако невозможность создать тогда кристалл SiC хорошего качества, а также быстрое развитие кремниевой электроники снизило научный и промышленный интерес к SiC . Новый импульс к широкому исследованию этого материала был дан недавним прогрессом в области выращивания монокристаллических объемных образцов и тонких пленок [7,8].

Особенностью карбида кремния является большое количество структурных форм этого материала или политипов [9,10], имеющих, однако, примерно одинаковую плотность (3.2 g/cm^3 , или $9.66 \cdot 10^{23} \text{ at./cm}^3$) [11]. Расположение ближайших атомов одинаково во всех формах, меняется лишь последовательность упаковки двойных углеродно-кремниевых слоев [12,13]. Насчитывается более чем 250 различных политипов [14], однако лишь два из них исследуются в связи с применением в электронных приборах: кубическая форма (3C) и гексагональная форма (6H) [12]. Форма 3C интересна из-за самой высокой подвижности электронов ($1000 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$) среди всех политипов, а структура 6H имеет самую большую величину запрещенной зоны — 2.9 eV [12].

Диффузия собственных дефектов в SiC изучалась многими авторами как экспериментально [15], так и теоретически [16–18]. Однако известно мало количественных данных о диффузионных параметрах материала, а уже полученные результаты сильно разнятся. Например, энергии активации миграции собственных атомов варьируются от 1.47 [18] и 3.26 [15] до $7\text{--}8 \text{ eV}$ [16] для углерода

и от 6 [18] до 9 eV [16] для кремния. Для вакансий известен лишь результат расчетов методом молекулярной динамики [18]: энергии активации миграции равны 6.1 eV для вакансии углерода и 7.4 eV для вакансии кремния.

Применение SiC в полупроводниковых приборах требует контролируемого и селективного легирования. Наиболее используемыми легирующими примесями являются N и P для *n*-типа и B, Al и Ga для *p*-типа [13]. Однако легирование SiC путем диффузии затруднено из-за малости коэффициентов диффузии примесей, которые для большинства примесей составляют от 10^{-13} до $10^{-8} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ для температурного интервала $1700\text{--}2400^\circ\text{C}$ [19]. Энергии активации миграции атомов Al и N составляют соответственно 6.1 [19] и 7.6 eV [20]. Таким образом, для удовлетворительных скоростей диффузии требуются температуры более 2000°C , при которых не только обычно используемая маска из оксида испаряется, но и сам SiC может химически разложиться. Альтернативный путь — ионная имплантация. Ее преимуществом является контролирование примесных распределений и концентраций путем изменений энергий и дозы имплантируемых ионов. При этом возникают проблемы, связанные с радиационным повреждением материала, которые, однако, могут быть решены путем отжига облученного образца при более низких температурах и в течение меньшего времени, чем в случае диффузионного легирования. Режим отжига для достижения оптимального результата зависит от типов и концентраций дефектов, генерированных облучением. Поэтому необходимо изучение процессов, происходящих при облучении и отжиге SiC . Такого рода исследования проводились для разных типов ионов как экспериментально [21–35], так и теоретически [36–40].

Теоретические исследования заключались в моделировании пробегов ионов в облученном SiC с помощью программы TRIM или других кодов, основанных на методе Монте-Карло [40]. В результате выяснено, что для корректного описания экспериментальных данных необ-

ходимо учитывать эффекты динамики и каналирования при ионном облучении [36–39]. Кроме того, обнаружено, что существенную роль в процессах имплантации играет то, какой политип подвергается облучению [40].

Основными экспериментальными результатами являются следующие. В зависимости от массы атома и температуры облучения концентрация дефектов увеличивается с ростом дозы ионов и при определенной критической плотности энергии, переданной на ядерные процессы, образуется аморфизированный слой. Для комнатной температуры такая критическая плотность энергии приблизительно равна $2 \cdot 10^{21}$ keV/cm³ [21,23], что соответствует уровню дефектности 0.2–0.25 смещений на атом [24]. При имплантации меняются свойства материала. При малых дозах увеличивается прочность, снижающаяся с началом аморфизации при больших дозах ионов [24,26]. Изменяются также химическая активность, оптические и электрические свойства SiC [27,28]. Для применения в электронных приборах дефектность должна быть снижена. В случае слабо поврежденного неаморфизированного материала практически все генерированные дефекты отжигаются при температурах 200–1000°C [22,25]. Поведение при отжиге аморфизированных слоев гораздо более сложно и еще недостаточно полно изучено. Так, в работах [22,25] сообщается, что рекристаллизация аморфизированного SiC начинается с температур выше 1450°C, а в работе [29] наблюдали начало рекристаллизации при температуре 1000°C. В работах [31–33] различными методами проводились исследования отжига при температурах 500, 950, 1500°C образцов SiC, облученных ионами Ge⁺ энергией 200 keV. Было получено, что дозы $1 \cdot 10^{14}$ см⁻² значительное количество дефектов не исчезает в процессе отжига при 1500°C, хотя материал рекристаллизуется, а после дозы $1 \cdot 10^{15}$ см⁻² материал содержит высокодефектные области после отжига при 1500°C. При этом, однако, наблюдается некоторая рекристаллизация материала. В работе сообщается о политипическом переходе 6H → 3C при температурах > 1300°C. Поскольку все же не удалось добиться полного отжига аморфного SiC, то многие авторы пытаются предотвратить аморфизацию путем повышения температуры облучения вплоть до 1800°C (см., например, [11,34,35]). Например, авторы работы [35] показали, что при имплантации ионов Ga и Sb при температурах 200–400°C аморфизация подавляется. Однако ни в одной работе не сообщается, что удалось полностью предотвратить аморфизацию. Показано, что при температурах 600–1000°C наблюдается минимальный уровень дефектности [34,35]. Это объясняется тем, что при низких температурах скорость рекомбинации вакансий и межузлий мала, чтобы предотвратить их накопление, а при высоких температурах радиационно-стимулированная сегрегация и кластерообразование ведут к появлению вторичных дефектов. Кроме того, в процессе отжига при температурах более 1000°C возможна деградация поверхности [35].

В настоящее время усилия исследователей направлены на создание технологии, позволяющей производить приборы, основанные на SiC, промышленным способом [8,13,41]. В свете этих исследований стало ясно, что свойства материала, нужные для применения SiC, затрудняют его производство. Например, стабильность при высоких температурах связана с низкой подвижностью атомов. Следовательно, как уже отмечалось выше, чрезвычайно высокие температуры необходимы для стимулирования диффузионных и отжиговых процессов. Однако процессы, происходящие при высоких температурах, трудно поддаются контролю и сильно затрудняют технологию изготовления приборов. Кроме того, в связи с высокотемпературными процессами встают проблемы

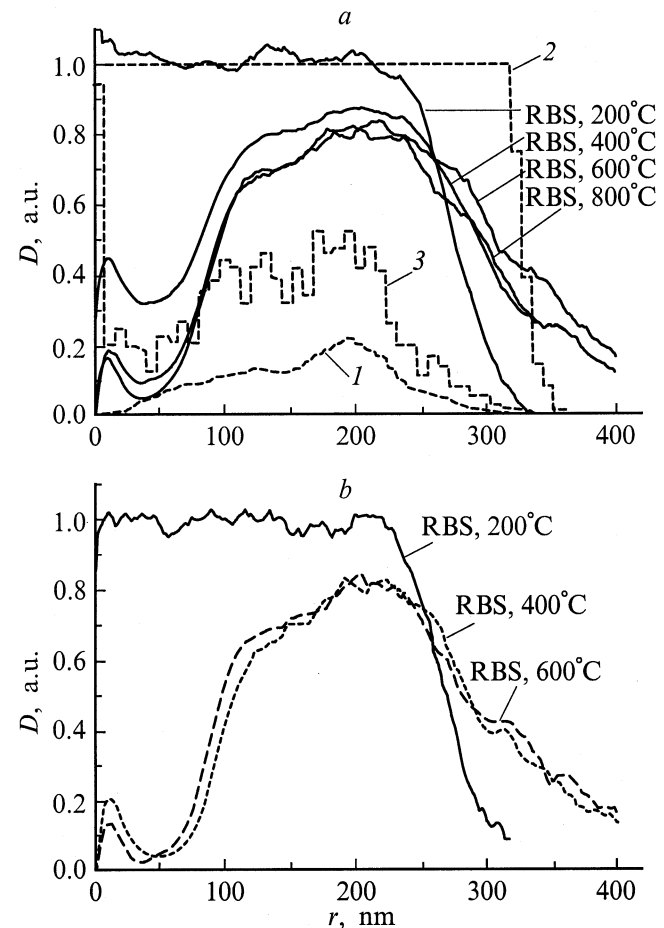


Рис. 1. *a* — сравнение экспериментальных и расчетных баллистических характеристик имплантированного карбида кремния (D — повреждаемость; r — глубина): экспериментальные RBS-профили залегания дефектов при различных температурах подложки; 1 — расчетный профиль имплантированных ионов азота и алюминия, 2 — расчетный суммарный профиль дефектов с учетом только баллистических (каскадных) процессов, 3 — расчетный баллистический профиль дефектов с учетом полной атермической рекомбинации; *b* — экспериментальные RBS-профили залегания дефектов после отжига в образцах, облученных при различных температурах подложки и впоследствии отожженных в течение 1 h при 1200°C.

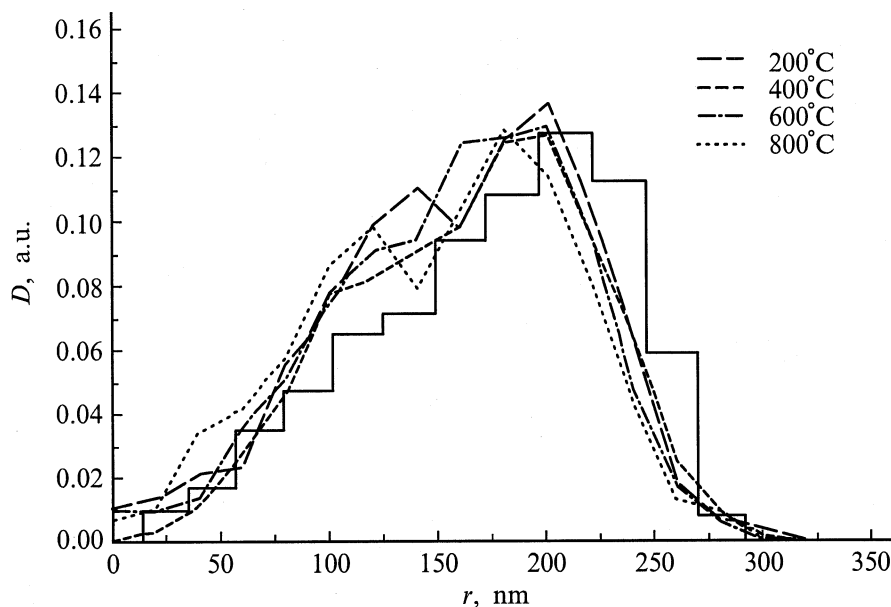


Рис. 2. Профили залегания азота при разных температурах подложек: сплошная линия — расчетный (с помощью программы DYTRIRS) баллистический профиль залегания азота при учете всех последовательных облучений; штриховые — экспериментальные ERD-распределения азота при различных температурах облучения.

загрязнения и деградации материала. Таким образом, очень важно развивать технологию при низких температурах.

Стандартный процесс для полупроводниковой технологии — это ионная имплантация. Так, ионная имплантация может применяться для создания $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$ — квазибинарной системы, широко изучаемой в последнее время. Стимулом для этого служат такие качества этой системы, как, во-первых, хорошая смешиваемость карбида кремния и нитрата алюминия, во-вторых, хорошее соответствие их кристаллических решеток, а также возможность менять ширину запрещенной зоны в пределах от 2.9 (6H-SiC) до 6.2 eV (2H-AlN) [42–45]. В работе [46] впервые сообщается о применении совместной имплантации ионов Al^+ и N^+ в 6H-SiC при высоких температурах для получения $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$. Облучение ионами каждого образца производилось в следующем порядке. Сначала ионами азота с энергией 65 keV и дозой $5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$, 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 обратного резерфордского рассеяния (RBS/C) с использованием пучка ионов He^+ с энергией 1.4 MeV. RBS-спектры обрабатывались с помощью специально разработанной компьютерной программы, позволяющей получать распределения дефектов структуры по глубине [47], представленные на рис. 1, а. После этого образцы были отожжены при температуре 1200°C в течение 1 h и снова исследованы методом

RBS (рис. 1, б). Обнаружено, что только облучение при температуре 200°C дает полностью аморфизированный слой, тогда как облучение при других температурах приводит к увеличению дефектности, но полной аморфизации не наблюдается. В образце, облученном при температуре 800°C, обнаружен политипический переход 6H SiC \rightarrow 3C SiC на интервале глубин 50–120 nm, идентифицируемый с помощью RBS-данных и результатов просвечивающей электронной микроскопии [48–50]. Авторы работы [47] делают заключение, что в облученном образце образуется твердый раствор SiC/AlN. В экспериментальной части работы [48] методом ERD были определены распределения ионов азота для карбида кремния, имплантированного ионами Al^+ и N^+ , представленные на рис. 2 (условия эксперимента такие же, как в работах [46,47]). В работе [51] методом PIRR (поляризационная инфракрасная спектроскопия) были обнаружены поля упругих напряжений сжатия на глубинах более 100 nm в имплантированных ионами азота и алюминия образцах SiC (условия эксперимента такие же, как в [46–50]).

Физическая модель

Полученные в работах [48–50] баллистические распределения ионов N^+ и Al^+ (DYTRIRS) представлены на рис. 1, а (кривая 1). Суммирование (с учетом дозы и без учета рекомбинации) рассчитанных с помощью программы TRIRS распределений дефектов по глубине для одного падающего иона [48–50] дает кривую 2 на рис. 1, а. Баллистические распределения имплантиро-

ванного азота (в результате всех четырех последовательных облучений при использованных в эксперименте дозах) представлены на рис. 2 (DYTRIRS). Сравнение баллистических данных (кривая 2 на рис. 1, а) и RBS-результатов для облучения при 200°C показывает, что такая температура не приводит к отжигу модифицированного ("аморфного") материала на глубине залегания имплантированных ионов азота и алюминия (кривая 1).

Если предположить для грубой оценки, что все вакансии и межузельные атомы, расположенные друг от друга на расстояниях спонтанной рекомбинации (см., например, [52]), атермически рекомбинируют, то оставшиеся собственные дефекты и имплантированные ионы дадут суммарный профиль, лежащий ниже экспериментальных данных RBS (кривая 3 на рис. 1, а). Из двух предельных случаев (только баллистические распределения — кривая 2 и учет полной рекомбинации — кривая 3 на рис. 1, а) уже видны существенные различия, а значит, их сравнение с экспериментальными данными (RBS) [47–50] выявляет роль процессов диффузии при высокотемпературной имплантации в разных по глубине областях облученного SiC.

В экспериментах (ERD), результаты которых впервые приведены в [48], измерены профили залегания ионов N⁺ (рис. 2, ERD) в образцах SiC. Сравнение их с баллистическим расчетным профилем азота для всей последовательности облучений при соответствующих экспериментальных дозах (рис. 2, DYTRIRS) показывает, что при использованных температурах имплантированный азот практически не диффундирует.

В соответствии с рис. 1, а [46,47] и работами [53,54] 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.

В работе [53] нами была предложена модель, описывающая эволюцию дефектов в SiC для экспериментальных условий [46–50] только в области $r > 120$ nm. При этом приповерхностный регион в [53] не рассматривался.

В развитие модели [53], для описания процессов, происходящих при облучении SiC ионами Al⁺ и N⁺ при температурах 400, 600°C во всем интервале глубин, предложим следующее [54].¹

¹ Образец, облученный при 800°C, в модели не рассматривается, поскольку при исследовании с помощью электронной просвечивающей микроскопии (ТЕМ [51]) в этом образце обнаружена особая многослойная микроструктура, отличная от структуры образцов, облученных при других температурах.

1. Ионы Al⁺ и N⁺, взаимодействуя с кристаллической решеткой SiC, образуют межузлия (i), 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. При имплантации ионы Al⁺ занимают вакансии в подрешетке кремния, ионы N⁺ — в подрешетке углерода [5] (относительная суммарная концентрация обоих ионов — $C(r, t)$).

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

4. Вакансии и имплантированные ионы считаются неподвижными, поскольку а) вакансии имеют большую энергию активации миграции [18]; б) из сравнения экспериментальных [47–49] и рассчитанных по DYTRIRS [48,49] профилей залегания ионов N⁺ в SiC (рис. 2) видно, что эти ионы не диффундируют при используемых температурах (то же самое предполагается для ионов Al⁺).

5. В области $r > 120$ nm межузлия углерода (iC) и кремния (iS) могут образовываться комплексы, состоящие из двух межузлий углерода или кремния (относительные концентрации $C_{2C}(r, t)$ и $C_{2S}(r, t)$).

6. В области $r < 120$ nm комплексы межузлий не образуются, что можно объяснить влиянием поверхности, в частности примесей на поверхности (см. пик на распределениях дефектов при $r < 50$ nm, рис. 1, а).

7. На глубинах порядка 100 nm, т.е. там, где концентрация дефектов возрастает (рис. 1), существуют поля внутренних упругих напряжений сжатия, обусловленные влиянием имплантированных ионов и образованных комплексов. Такие поля внутренних напряжений, идентифицируемые методом PIRR [51], оказывают влияние на диффузию межузлий. В работе [53] это влияние эффективно было учтено путем уменьшения коэффициента диффузии в области около 100 nm.

На основе предположений (1)–(7) запишем систему балансных кинетических уравнений для вышеназванных относительных концентраций точечных дефектов, зависящих от глубины r и времени t ,

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

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

$$\frac{\partial C_{iS}(r, t)}{\partial t} = g_{iS}(r, t) - \text{div} J_{iS}(r, t) - \mu_S D_{iS} C_{iS}(r, t) C_{vS}(r, t) - \alpha_{iS} D_{iS} C_{iS}^2(r, t), \quad (3)$$

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

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

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

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

Здесь $g_l(r,t)$ — скорость генерации соответствующих дефектов ($l = iC, iS, vC, vS, Al, N$), при облучении $g_l(r,t) = J P_l(r)$, где $J = 6.24 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ [46,47] — плотность потока падающих ионов, $P_l(r)$ — распределения дефектов l по глубине, созданных одним падающим ионом, определенные из расчетов по TRIRS [48,49] (суммарные профили для всех дефектов с учетом дозы и без учета рекомбинации приведены в [48] 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 ($j = iC, iS$), $\varepsilon_{iC}^m = 1.47 \text{ eV}$ [18], а поскольку значение величины ε_{iS}^m неизвестно из литературы, то оно варьировалось в ходе расчетов; $D_{0j} = 10^{-3} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$; α_j — параметр образования комплексов соответствующих дефектов, ($\alpha_j \approx 4\pi a$ при $r > 120 \text{ nm}$ и $\alpha_j = 0$ при $r < 120 \text{ nm}$ (по предложениям 5 и 6) ($j = iC, iS$), где $a \approx 2 \text{ \AA}$ — среднее межатомное расстояние в SiC).

Влияние полей упругих напряжений на диффузию межузлий учитывается путем введения дрейфового члена в выражения для потока мигрирующих дефектов $J_j(r,t)$ ($j = iC, iS$) (см. уравнения (1), (3)) [52]

$$J_j(r,t) = -D_j \nabla C_j(r,t) - D_j \frac{C_j(r,t)}{kT} \nabla E_{str}^j(r,t), \quad (8)$$

где $E_{str}^j(r)$ — энергия взаимодействия дефекта j с полем напряжений.

Имеются только качественные данные о пространственной зависимости $E_{str}^j(r)$ (см. табл. 1 в [51]), но точно эта зависимость неизвестна, поэтому использовались различные способы вычисления выражения для потока. В работе [53] затрудненность диффузии межузлий углерода и кремния в области $r < 120 \text{ nm}$ вследствие возможных напряжений сжатия (см. предположение 7) эффективно учитывалось в диффузионных членах $D_j \Delta C_j(r,t)$ уравнений (1) и (3) посредством понижения коэффициентов диффузии без рассмотрения дрейфового числа в выражении для дивергенции потока. Причем такое уменьшение задавалось в различных точках области $r < 120 \text{ nm}$ поразному, поскольку поле напряжений должно зависеть от пространственной координаты, что видно из неоднородности распределения дефектов на рис. 1, а. Кроме того, в [53] уменьшение коэффициента диффузии межузлий было задано следующим образом: коэффициент диффузии межузлий по направлению уменьшения поля (т.е. из объема в приповерхностную область) больше, чем в обратную сторону.

С целью уточнения полученных результатов в настоящей работе была предпринята попытка учесть дрейфовый член в выражении для потока мигрирующих межузлий (8). Для этого энергия взаимодействия межузлий с полем напряжений $E_{str}^j(r, T)$ была представлена как

$$E_{str}^j(r, T) = \Delta \Omega_j S p \sigma(r), \quad (9)$$

где $\Delta \Omega$ — изменение атомного объема, вносимое дефектами; $S p \sigma(r)$ — след поля напряжений $\sigma_{ij}(r)$.

Для вычисления $\sigma_{ij}(r)$ необходимо просуммировать поле напряжений от имплантированных ионов и образованных комплексов, которые вносят свой вклад в результирующее поле. Поскольку для настоящей задачи сделать это чрезвычайно сложно, то была предложена следующая аппроксимация:

$$S p \sigma(r) = \frac{A}{a^3} f(r), \quad (10)$$

где a — межатомный параметр; A — множитель с размерностью энергии; $f(r)$ — безразмерная функция координат, задающая пространственную зависимость $E_{str}^j(r, T)$.

Поскольку внутренние напряжения должны отражать дефектную картину, их определяющую, то функция $f(r)$ была выбрана в виде относительного распределения дефектов в образце, имплантированном ионами при 600°C и отожженном, т.е. фактически как распределение стабильных дефектов (кривая б на рис. 3). Тогда, подставляя (10) в (9), получаем

$$E_{str}^j(r, T) = K(T) f(r), \quad (11)$$

где $K(T) = \Delta \Omega_j A / a^3$ — множитель, определяющий величину энергии взаимодействия.

Зависимость энергии $E_{str}^j(r, T)$ от температуры можно объяснить тем, что при различных температурах облучения формируются дефекты разной природы, создающие свои собственные поля напряжений. Такая аппроксимация позволяет корректно решать уравнения (1), (3) с учетом дрейфового члена в выражении для потока $J_j(r, t)$ ($j = iC, iS$; см. уравнение (8)).

Поскольку в исходных (до облучения) образцах предполагается отсутствие дефектов, то начальные условия для концентраций будут

$$C_l(r, t)|_{t=0} = 0, \quad (12)$$

где $l = iC, iS, vC, vS, Al, N$.

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

$$\frac{\partial C_j(r, t)}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad (13)$$

т.е. отсутствие потока диффундирующих дефектов через поверхность;

$$C_j(r, t)|_{r=\infty} = 0, \quad (12a)$$

т.е. равенство нулю концентрации дефектов $j = iC, iS$ на бесконечной глубине.

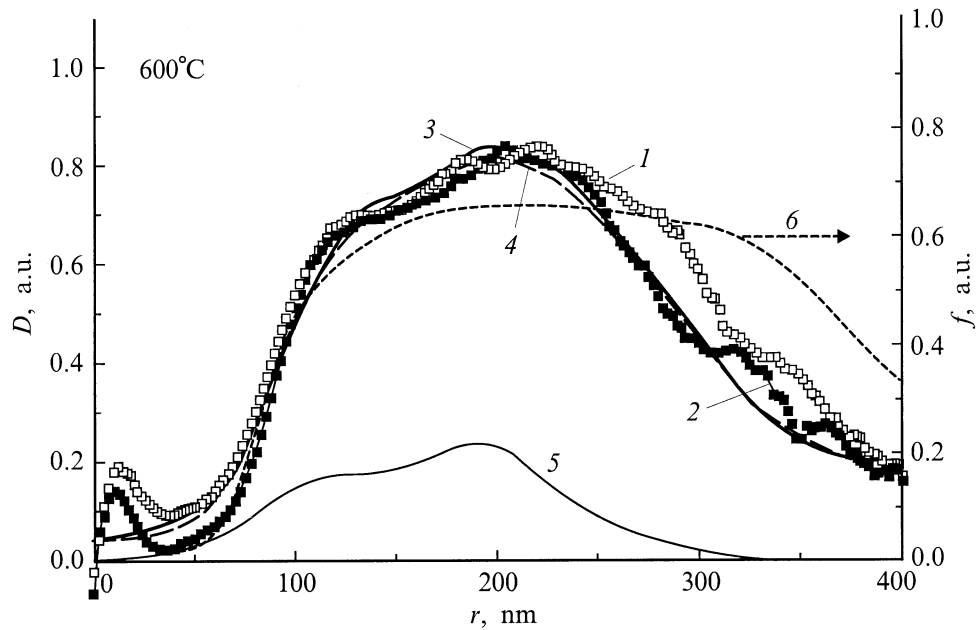


Рис. 3. Сравнение экспериментальных RBS-профилей залегания дефектов [47-49] с рассчитанными суммарными распределениями дефектов (при учете диффузионных процессов) в образцах SiC, облученных при температуре 600° и отожженных при 1200°C: 1 и 2 — экспериментальные результаты работ [47-49] по облучению и отжигу соответственно, 3 — расчет (профили для облучения и отжига совпадают), 4 — расчетные результаты работы [53], 5 — рассчитанный по DYTRIRS суммарный баллистический профиль залегания ионов в SiC [48], 6 — пространственная зависимость энергии взаимодействия $E_{str}^j(r)$ дефекта j с полем напряжений, т. е. функция $f(r)$.

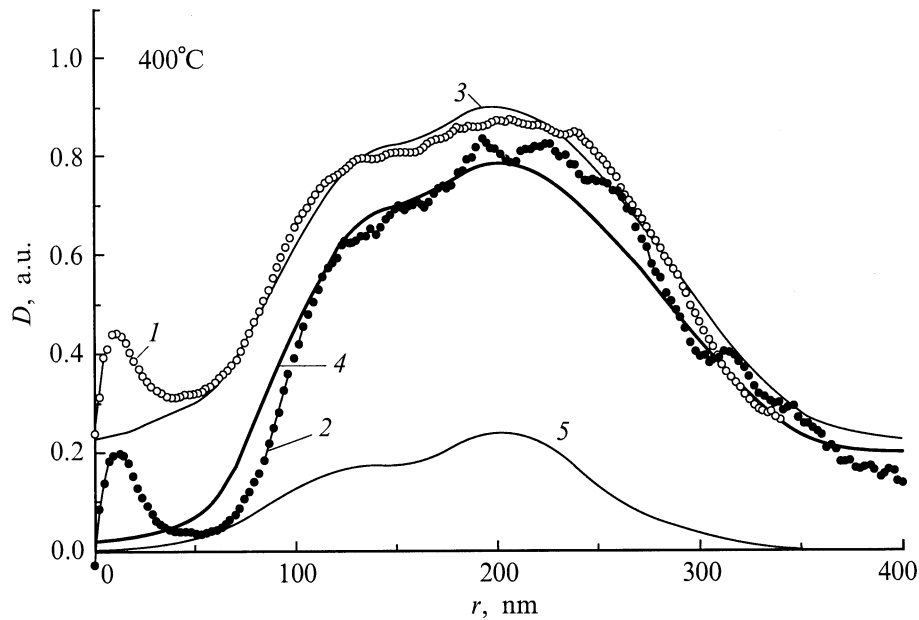


Рис. 4. То же, что и на рис. 3, но образцы облучались при температуре 400°C (1-5 соответствуют кривым на рис. 3).

Для описания отжига при 1200°C облученных образцов предположим, что 8) возможна рекомбинация вакансий и межузлий; 9) новые комплексы не формируются, 10) комплексы, образованные при облучении, считаются стабильными.

В соответствии с предположением 1 при отжиге $g_l(r, t) = 0$ для всех видов дефектов ($l = iC, iS, vC, vS, Al, N$), $\alpha_j = 0$ ($j = iC, iS$; см. предположение 9), т. е. в системе (1)–(7) остаются только уравнения (1)–(4).

Результаты

Система уравнений (1)–(7), описывающая эволюцию дефектов в SiC, облученном при температурах 400, 600°C, и система (1)–(4) для описания отжига образца при 1200°C решались численно с помощью программы MGEAR [55]. В результате расчетов получены распределения концентраций дефектов в SiC после имплантации при 400, 600°C и отжига облученных образцов при 1200°C. На рис. 3 представлены рассчитанные и экспериментальные (RBS) суммарные распределения дефектов после имплантации. Видно, что теоретические результаты (кривые 3, 4) удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными как для случая облучения (кривая 1), так и для случая отжига (кривая 2).

На рис. 4 показано сравнение расчетных (кривые 3, 4) и экспериментальных данных (кривые 1, 2) для имплантированного при 400°C образца SiC. Из расчетов видно, что рекомбинация вакансий и межузлий, оставшихся после имплантации при 400°C, в ходе отжига при 1200°C приводит к уменьшению суммарной концентрации дефектов в образце (кривые 3 и 4 на рис. 4). В течение облучения при 600°C вакансии и свободные межузлия рекомбинируют уже в процессе имплантации, поэтому кривые для облученного и отожженного образцов практически совпадают (рис. 3).

Возможно различие в характере поведения расчетных и экспериментальных кривых вблизи поверхности (при $r < 50$ nm). Это связано с тем, что в модели не учитываются примеси на поверхности, возникающие в процессе изготовления образцов (см. пик на экспериментальном распределении дефектов, кривые 1, 2 на рис. 3, 4).

В ходе расчетов [53, 54] и в настоящей работе 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 Si в карбиде кремния $\varepsilon_{iS}^m \approx 1.55$ eV, параметры рекомбинации в подсистемах углерода $\mu_C \approx 4\pi \cdot 10^{-12}$ cm и кремния $\mu_S \approx 4\pi \cdot 10^{-10}$ cm; множители

$$K(T_1) = 0.21 \text{ eV} \quad (T_1 = 400^\circ\text{C}) \quad (13a)$$

и

$$K(T_2) = 0.49 \text{ eV} \quad (T_2 = 600^\circ\text{C}). \quad (13b)$$

Соотношения (13a), (13b) показывают, что энергии взаимодействия мигрирующих межузлий с полями внутренних напряжений (см. (11)), обусловленными имплантированными ионами и комплексами, различаются для образцов, облученных при разных температурах. Это можно объяснить зависимостью от температуры как формирующихся при имплантации дефектных структур, так и создаваемых ими полей внутренних напряжений. Например, возможно увеличение размера межузельных комплексов с ростом температуры имплантации, что должно отражаться в возрастании величин их полей напряжений. Из (11) и (13) видно, что энергия взаимодействия межузлий с полем напряжений для образца, облученного при 600°C, больше, чем для образца, облученного при 400°C. Кроме того, в образцах, имплантированных при 800°C и отожженных, на глубинах порядка 100 nm формируются дефекты, которые можно идентифицировать как межузельные дислокационные петли [47].

Заключение

В настоящей работе с учетом полей упругих напряжений сжатия, созданных имплантированными ионами и комплексами межузельных атомов, развита предложенная нами в [53] модель, описывающая эволюцию дефектов в образцах карбида кремния при высокотемпературной высокодозной имплантации ионами Al⁺ и N⁺, а также при последующем отжиге. На основе этой модели рассчитаны распределения дефектов, удовлетворительно согласующиеся с экспериментальными RBS-данными. Сравнение теоретических и экспериментальных результатов позволило установить иерархию дефектов, образованных в процессе имплантации. Получены численные оценки отдельных кинетических параметров карбида кремния.

Работа частично поддержана грантами РФФИ № 97-02-18090, № 96-02-17952 и проектом № 467-97 МНТЦ.

Список литературы

- [1] Harris G.L. Properties of Silicon Carbide. London: INSPEC, 1995. 339 p.
- [2] Shenai K., Scott R.S., Baliga B.J. // IEEE Trans. Elec. Dev. 1989. Vol. 36. P. 1811–1820.
- [3] Ruff M., Mitlehner H., Helbig R. // IEEE Trans. Elec. Dev. 1994. Vol. 41. P. 1040.
- [4] Pensl G., Troffer Th. // Solid State Phenomena. 1996. Vol. 47–48. P. 115.
- [5] Choyke W.J., Pensl G. // MRS Bulletin. 1997. N 3. P. 25.
- [6] O'Connor J.R., Smiltens J. Silicon Carbide, a High-Temperatures Semiconductor. New York: Pergamon, 1960. 435 p.
- [7] Davis R.F., Kelner G., Shur M., Palmour J.W., Edmond J.A. // Proc. IEEE. 1991. Vol. 79. P. 677–689.
- [8] Powell J.A., Neudeck P.G., Matus L.G., Petit J.B. // Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 1992. Vol. 242. P. 495–501.

- [9] Verma A., Krishna P. Polymorphism and Polytypism in Crystals. New York: Wiley, 1966. 233 p.
- [10] Pirouz P., Yang J.W. // Ultramicroscopy. 1993. Vol. 51. P. 189–197.
- [11] Heera V., Skorupa W. // Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 1997. Vol. 438. P. 241–252.
- [12] Edgar J.H. // J. Mater. Res. 1992. Vol. 7. N 1. P. 235–245.
- [13] Wesch W. // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 1996. Vol. 116. P. 305–315.
- [14] Fisher G.R., Barnes P. // Phylos. Mag. B. 1990. Vol. 61. P. 217–228.
- [15] Evino P., Li J., Huntz A.M., Chaumont J. // Mater. Sci. Eng. B. 1992. Vol. 11. P. 331–344.
- [16] Dunbar P., Birnie P. // J. Amer. Ceram. Soc. 1986. Vol. 69. P. 33–40.
- [17] Константинов А.О. // ФТП. 1992. Т. 26. Вып. 2. С. 270–282.
- [18] Huang H., Chonien N. // J. Nucl. Mater. 1994. Vol. 212–215. P. 148–155.
- [19] Мохов Е.Н., Водаков Ю.А., Ломакина Г.А. // ФТП. 1969. Т. 11. С. 519–530.
- [20] Kroto L.J., Mitnes A.G. // Sol. St. Electron. 1996. Vol. 9. P. 1125–1134.
- [21] Spitznagel J.A., Wood S., Choyke W.J. et al. // Nucl. Instr. Meth. B. 1986. Vol. 16. P. 237–245.
- [22] Davis R.F. // Thin Solid Films. 1989. Vol. 181. P. 1–10.
- [23] Edmond J.A., Withrow S.P., Kong H.S., Davis R.F. // Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 1986. Vol. 51. P. 395–404.
- [24] McHargue C.J., Williams J.M. // Nucl. Instr. Meth. B. 1993. Vol. 80/81. P. 889–900.
- [25] Fohl A., Emrick R.M., Carstanjen H.D. // Nucl. Instr. Meth. B. 1992. Vol. 65. P. 335–347.
- [26] McHargue C.J., Joslin D.L., Williams J.M. // Nucl. Instr. Meth. B. 1990. Vol. 46. P. 185–193.
- [27] Derst G., Wilbertz C., Bhatia K.L., Kratshmer W., Kalbitzer S. // Appl. Phys. Lett. 1989. Vol. 54. P. 1722–1725.
- [28] Wendler E., Heft A., Zammit U. et al. // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 1996. Vol. 116. P. 396–406.
- [29] Wesch W., Heft A., Heindl J. et al. // Nucl. Instr. Meth. B. 1995. Vol. 106. P. 339–351.
- [30] Petzold J., Kalnin A.A., Moskwina D.R., Savelyev W.D. // Nucl. Instr. Meth. B. 1993. Vol. 80/81. P. 8943–8951.
- [31] Perez-Rodríguez A., Pacaud Y., Calvio-Barro L. et al. // J. Electr. Mater. 1996. Vol. 25. P. 541–552.
- [32] Pacaud Y., Stoemenos J., Brauer G. et al. // Nucl. Instr. Meth. B. 1996. Vol. 120. P. 177–185.
- [33] Pacaud Y., Skorupa W., Stoemenos J. // Nucl. Instr. Meth. B. 1996. Vol. 120. P. 181–190.
- [34] Gardner J., Rao M.V., Holland O.W. et al. // J. Electr. Mater. 1996. Vol. 25. P. 885–894.
- [35] Glaser E., Heft A., Heindl J. et al. // Inst. Phys. Conf. Ser. 1996. Vol. 142. P. 557–563.
- [36] Toda T., Yagi K., Koga K., Yoshida K., Niina T. // Proc. 6th ICSCRM. IOPC. Ser. 142. IOP Publ., 1996. P. 545–551.
- [37] Ahmed S., Barbero C.J., Sigmon T.W. // J. Appl. Phys. 1995. Vol. 77. P. 6194–6201.
- [38] Behar M., Fichtner P.F.P., Grande P.L., Zawislak F.C. // Mater. Sci. Eng. 1995. Vol. 15. P. 1–9.
- [39] Heera V., Stoemenos J., Kogler R., Skorupa W. // J. Appl. Phys. 1995. Vol. 77. P. 2999–3006.
- [40] Albertazzi E., Lulli G. // Nucl. Instr. Meth. B. 1996. Vol. 120. P. 147–155.
- [41] Neudeck P.G. // J. Electr. Mater. 1995. Vol. 24. P. 283–289.
- [42] Culter B., Viber P.D., Rafaniello W. et al. // Nature. 1978. Vol. 275. P. 434–438.
- [43] Rafaniello W., Cho K., Yrkar Y. // J. Mater. Sci. 1981. Vol. 16. N 1. P. 3–11.
- [44] Zangvil A., Ruh R. // J. Amer. Ceram. Soc. 1988. Vol. 71. P. 884–892.
- [45] Kern R.S., Tanaka S., Davis R.F. // Inst. Phys. Conf. Ser. 1994. Vol. 137. P. 389–395.
- [46] Yankov R.A., Hatzopoulos N., Fukarek W. et al. // Mat. Res. Symp. Proc. 1997. Vol. 438. P. 271–276.
- [47] Pezoldt J., Yankov R.A., Fukarek W. et al. // Proc. 39th Electronic Materials Conf. Colorado (USA), 1997. To be publ. in J. Electron. Mater.
- [48] Янков Р.А., Фельскон М., Крайцис У. и др. // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. Вып. 16. С. 6–14.
- [49] Kharlamov V.S., Kulikov D.V., Truschin Yu.V. et al. // Program and Abstracts of International Workshop on New Approaches to Hi-Tech Materials 97 (Nondestructive Testing and Computer Simulations in Materials Science and Engineering). St. Petersburg, 1997. P. C2–C13.
- [50] Truschin Yu.V., Yankov R.A., Kharlamov V.S. et al. // Material Science Forum. 1998. Vol. 264–268. P. 757–760.
- [51] Yankov R.A., Fukarek W., Voelskow M. et al. // Materials Science Forum. 1998. Vol. 264–268. P. 753–756.
- [52] Truschin Yu.V. Theory of Radiation Processes in Metal Solid Solutions. New York: Nova Science Publishers Inc., 1996. 405 p.
- [53] Куликов Д.В., Трушин Ю.В., Янков Р.А. и др. // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 24. Вып. 1. С. 39–44.
- [54] Kulikov D.V., Pezoldt J., Rybin P.V. et al. // Program and Abstract of International Workshop on New Approaches to HiTech Materials 98 (Nondestructive Testing and Computer Simulations in Materials Science and Engineering). St. Petersburg, 1998. P. E7.
- [55] Kulikov D.V., Suris R.A., Truschin Yu.V. // Supercond. Sci. & Techn. 1995. Vol. 8. P. 303–310.