

Вакансионная модель аннигиляции микротрубок в эпитаксиальных слоях карбида кремния

© С.Ю. Давыдов[¶], А.А. Лебедев

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

(Получена 30 ноября 2010 г. Принята к печати 6 декабря 2010 г.)

В рамках предложенной авторами ранее вакансионной модели гетерополитипной эпитаксии карбида кремния (ФТП, **39**, 296 (2005); **41**, 641 (2007)) рассмотрены кинетические процессы аннигиляции (зарастания) микротрубки, проникающей в растущий слой из затравки-подложки. Найдено соотношение между скоростью роста эпитаксиального слоя, временем жизни вакансии и толщиной дефектного слоя, при котором микротрубка зарастает. Учитываются оба типа вакансий — углеродные и кремниевые. Предложена также упрощенная линейная модель процесса зарастания микротрубки, в рамках которой определено соотношение между диаметром микротрубки r_0 и толщиной дефектного слоя l^* : $l^* = r_0(G/g)$, где G — скорость роста слоя, g — скорость вакансии, что для реальных условий роста дает $l^* \approx 6r_0$.

1. Введение

Карбид кремния незаменим при изготовлении широкого класса приборов нового поколения силовой и оптоэлектроники. Высокое качество SiC-подложек является основным условием, определяющим процент выхода годных изделий при производстве эпитаксиальных структур. Несмотря на значительный прогресс в технологии получения монокристаллического карбида кремния, существует ряд факторов, препятствующих выходу высококачественных образцов. К таким факторам относятся, например, структурные дефекты, наличие которых определяется в основном качеством кристаллической затравки [1]. Типичными дефектами структуры материала являются проникающие винтовые и краевые дислокации и формирующиеся вокруг них полые микротрубки.

Будем предполагать, что растущий на подложке эпитаксиальный слой наследует всю дефектность подложки. В частности, если на поверхности подложки находятся выходы винтовых дислокаций, вокруг которых формируются микротрубки, то эти трубки будут прорастать в образующуюся пленку [1]. При подборе определенной скорости роста эпитаксиальной пленки концентрация таких микротрубок может уменьшаться. В дальнейшем мы будем полагать, что такое уменьшение концентрации микротрубок может быть объяснено их аннигиляцией (зарастанием). В настоящем разделе мы изучим кинетику такого процесса. Для начала рассмотрим вакансии одного типа, а именно углеродные вакансии V_C , концентрацию которых будем обозначать через N_V^C . В дальнейшем полученные результаты будут обобщены на вакансии обоих типов, т.е. будут также учтены кремниевые вакансии V_{Si} . В этом исследовании мы будем опираться на предложенную нами ранее вакансионную модель гетерофазной эпитаксии [2,3].

2. Вакансии углерода

Очевидно, что изменение концентрации вакансий от значений, характерных для подложки, до значений, характерных для эпитаксиального слоя, будет происходить не мгновенно, а в течение некоторого промежутка времени. Предположим для простоты, что за это время на подложке будет образовываться переходный слой, имеющий тот же политип, что и использовавшаяся для роста подложка, в котором, однако, концентрация углеродных вакансий будет ниже концентрации, соответствующей подложке $(N_C)_S$. Встает вопрос, что понимать под концентрацией $(N_C)_S$ для кристалла, содержащего микротрубки? Ясно, что в области самой трубки

$$(N_C)_S = \frac{1}{2} N_0, \quad (1)$$

где N_0 — концентрация атомов в политипе карбида кремния, из которого приготовлена подложка.

Будем считать, что аннигиляция (зарастание) микротрубки происходит в момент, когда концентрация вакансий N_C уменьшится до концентрации \bar{N}_C , соответствующей естественному содержанию углеродных вакансий в данном политипе [2]. Будем считать также, что при этом толщина слоя $l = l^*$. Такой переходный слой будем называть дефектным.

Предположим, что изменение N_C в пленке во времени подчиняется уравнению

$$dN_C/dt = -N_C/\tau, \quad (2)$$

что дает

$$N_C = \frac{1}{2} N_0 \exp(-t/\tau), \quad (3)$$

где τ — среднее время жизни углеродных вакансий в области микротрубки. Время t^* , за которое завершается зарастание микротрубки, равно

$$t^* = \tau \ln(N_0/2\bar{N}_C).$$

[¶] E-mail: sergei_davydov@mail.ru

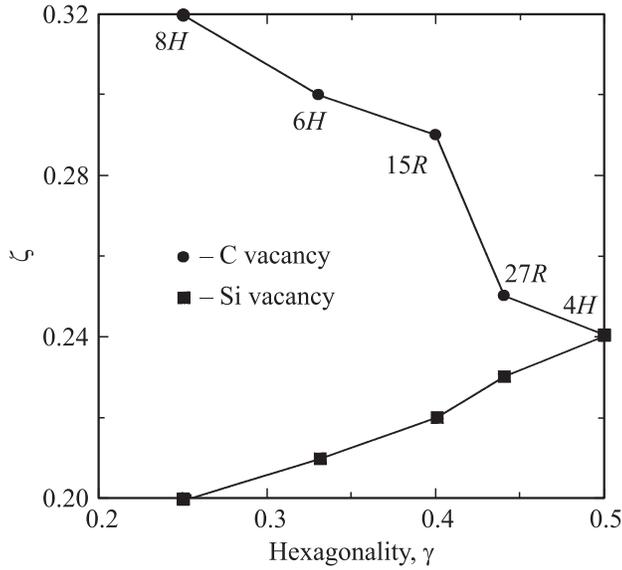


Рис. 1. Зависимость отношений $\xi_C = G\tau_C/l_C^*$ и $\xi_{Si} = G\tau_{Si}/l_{Si}^*$ от степени гексагональности γ политипа карбида кремния.

Положим $Gt^* = l^*$, где G — скорость роста слоя. Тогда имеем

$$\tau = (l^*/G)[\ln(N_0/2\bar{N}_C)]^{-1}. \quad (5)$$

Параметры задачи τ , l^* и G являются характеристиками конкретного технологического процесса. С другой стороны, для всех технологических процессов, приводящих к зарастанию микротрубки, параметр

$$\xi = G\tau/l^* = [\ln(N_0/2\bar{N}_C)]^{-1} \quad (6)$$

должен быть одним и тем же для данного политипа. Результаты расчета параметра ξ в функции от степени гексагональности политипа γ представлены на рис. 1. При этом значения $N_0 = 9.6 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ (одинаковые для всех политипов), \bar{N}_C и γ взяты из работы [4]. Отметим, что углеродные вакансии не являются термодинамически равновесными, а связаны с отклонением от стехиометрии, т.е. с величиной отношения $\text{Si}/\text{C} \neq 1$, задаваемого условиями нанесения пленки.

Зная значения l^* и G для различных случаев эпитаксии, можно определить временную постоянную τ :

$$\tau = \xi \frac{l^*}{G}. \quad (7)$$

При $G \approx 20 \text{ мкм/ч}$ и $l^* \approx 30 \text{ мкм}$ получаем $\tau \approx 15\text{--}20$ мин.

Рассмотрим скорость движения вакансии. За время жизни в переходном слое τ вакансия проходит путь, равный диффузионной длине $l_V = \sqrt{D\tau}$, где D — коэффициент диффузии углеродных вакансий в данном политипе SiC. Следовательно, скорость вакансии $g = \sqrt{D/\tau}$.

Теперь выражение для параметра ξ может быть записано в виде

$$\xi = \frac{G}{g} \frac{l_V}{l^*}.$$

В соответствии с оценками [2,3] отношение $G/g \approx 6$, откуда при $l^* \approx 30 \text{ мкм}$ получаем $l_V \approx 1.5 \text{ мкм}$.

Среднее время жизни вакансии должно быть таковым, чтобы она не успела за это время выйти из области микротрубки. Пусть радиус микротрубки на поверхности подложки равен r_0 . Тогда $g\tau \leq r_0$, откуда следует, что

$$\xi \leq \frac{G}{g} \frac{r_0}{l^*}. \quad (10)$$

3. Вакансии углерода и кремния

Теперь обобщим полученные результаты на диффузию вакансий как углерода, так и кремния. Естественно считать, что диффузия вакансий V_C и V_{Si} из области микротрубки в пленку происходит независимым образом. Тогда, согласно работе [3], можно написать вместо уравнения (2) систему уравнений вида

$$\begin{aligned} dN_C/dt &= -N_C/\tau_C, \\ dN_{Si}/dt &= -N_{Si}/\tau_{Si}, \end{aligned} \quad (11)$$

откуда

$$\begin{aligned} N_C(t) &= \bar{N}_C \exp(-t/\tau_C), \\ N_{Si}(t) &= \bar{N}_{Si} \exp(-t/\tau_{Si}), \end{aligned} \quad (12)$$

где τ_C и τ_{Si} — время жизни углеродных и кремниевых вакансий в переходном слое (в этом разделе мы опускаем вакансионные индексы V). Здесь мы учли, что концентрации вакансий обоих атомов в области микротрубки со временем убывают.

Для интервалов времени t_C^* и t_{Si}^* , за которые в области микротрубки концентрации вакансий V_C и V_{Si} соответственно принимают значения \bar{N}_C и \bar{N}_{Si} , характерные для данного политипа SiC, имеем

$$\begin{aligned} t_C^* &= \tau_C \ln(N_0/2\bar{N}_C^S)^{-1}, \\ t_{Si}^* &= \tau_{Si} \ln(N_0/2\bar{N}_{Si}^S)^{-1}. \end{aligned} \quad (13)$$

Положим $t_C^* = l_C^*/G$ и $t_{Si}^* = l_{Si}^*/G$. Тогда получим

$$\xi_C = G\tau_C/l_C^* = [\ln(N_0/2\bar{N}_C)]^{-1}, \quad (14)$$

$$\xi_{Si} = G\tau_{Si}/l_{Si}^* = [\ln(N_0/2\bar{N}_{Si})]^{-1}. \quad (15)$$

Результаты расчета ξ_{Si} (как и ξ_C) представлены на рис. 1. В соответствии с нашей моделью, из двух характерных толщин слоя l_C^* и l_{Si}^* надо выбрать наибольшую, что гарантирует исчезновение микротрубки. Оценки, сделанные по данным работы [3], относящейся физически к несколько иному случаю гетероэпитаксии, но математически аналогичной рассматриваемой здесь картине, показывают, что $\tau_C \approx \tau_{Si}$. Если считать, что и скорости углеродных и кремниевых вакансий также

одного порядка, то в качестве характерного значения параметра ξ нужно выбрать меньшую из величин ξ_C и ξ_{Si} , т.е. ξ_{Si} (рис. 1). Необходимо, однако, отметить, что данные нами оценки параметров достаточно грубы. Для более адекватного анализа требуются экспериментальные данные по кинетике углеродных и кремниевых вакансий в различных политипах SiC.

4. Линейная модель зарастания микротрубки

Сформируем теперь простую *линейную модель* зарастания микротрубки. Для этого вновь предполагаем, что на поверхность подложки выходят микротрубки, сформированные на винтовых дислокациях. Так как эпитаксиальный слой растет со скоростью G , значительно меньшей, чем та, при которой была выращена подложка, дефекты, присутствующие в слое, в основном имеют „подложечное“ происхождение. Другими словами, концентрация проросших в эпитаксиальный слой (пленку) дефектов будет значительно больше, чем собственно пленочных [4].

В работе [2] на основании анализа работ [5,6] показано, что при температуре $T = 2200$ К диффузионная скорость миграции вакансий $g \approx 3-4$ мкм/ч. Будем считать скорость роста эпитаксиального слоя $G \approx 20$ мкм/ч. [1]. В дальнейшем все процессы будем приближенно полагать линейными по времени роста слоя t .

Пусть радиус микротрубки, выходящей на поверхность подложки, есть r_0 . Предположим, что зарастание поры можно описать оттоком вакансий от микротрубки, прорастающей в эпитаксиальный слой (рис. 2). Тогда радиус поры $r(t)$ уменьшается линейно со временем t :

$$r(t) = r_0 - gt. \quad (16)$$

Здесь за величину g нужно принять скорость „медленной“ вакансии.

За это же время образуется эпитаксиальный слой толщины $l(t)$, где

$$l(t) = Gt. \quad (17)$$

Пусть в момент времени t^* пора зарастает, т.е. $r(t^*) = 0$. Из (16) получаем

$$t^* = \frac{r_0}{g}. \quad (18)$$

Тогда толщина образовавшегося за время t^* эпитаксиального слоя есть

$$l^* = r_0 \frac{G}{g}. \quad (19)$$

При $t > t^*$ растет уже бездефектный слой, вернее, слой, в котором память о подложечных микротрубках отсутствует. Полагая $G/g \approx 6$, имеем $l^* \approx 6r_0$.

Отметим, что процесс, здесь рассмотренный, чрезвычайно упрощен. Поэтому выражения (18) и (19) дают минимальные значения t^* и l^* , т.е. нами получены оценки „снизу“.

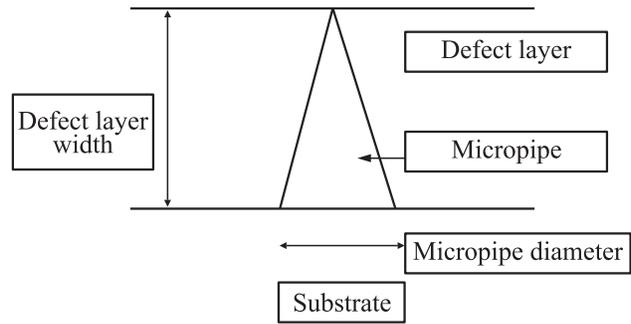


Рис. 2. Схематическое изображение аннигиляции микротрубки при эпитаксиальном росте слоя на подложке.

Так как, согласно [2], скорость

$$g = g_0 \exp(-E_d/kT), \quad (20)$$

где E_d — энергия активации диффузии, k — постоянная Больцмана, g_0 — предэкспоненциальный множитель, то

$$t^* = (r_0/g_0) \exp(E_d/kT). \quad (21)$$

Отсюда следует, что чем больше энергия активации (высота диффузионного барьера) E_d , тем выше значения t^* . По оценкам [2], среднее значение $E_d \approx 5-8$ эВ.

Плотность дислокаций в исследуемых образцах была порядка $\rho_s \approx 10^5$ см⁻² [1]. Следовательно, среднее расстояние между выходами соседних микротрубок на поверхность подложки $R \approx \rho_s^{-1/2} \approx 100$ мкм. Микротрубки можно считать изолированными, если $r_0 \ll R$.

Отметим, что, согласно [2,8],

$$l^* \propto \exp[-(Q + E_a - E_d)/kT], \quad (22)$$

где Q — теплота сублимации SiC, E_a — высота потенциального барьера, который (в процессе роста) должна преодолеть частица, чтобы сесть на поверхность подложки. Подчеркнем, что параметр E_a является не только характеристикой системы частица-подложка, но зависит и от способа нанесения слоя (см. подробнее [7]).

5. Заключение

Таким образом, в настоящей работе мы показали, что наблюдаемое в работе [1] уменьшение концентрации микротрубок, проникающих в эпитаксиальный слой, может быть объяснено их аннигиляцией в дефектном слое. Такая аннигиляция определяется диффузионным оттоком вакансий из области микротрубки. В частности, определено соотношение между диаметром микротрубки r_0 и толщиной дефектного слоя l^* : $l^* = r_0(G/g)$, где G — скорость роста слоя, g — скорость вакансии, что для реальных условий роста дает $l^* \approx 6r_0$.

Предложенная модель является, по-видимому, простейшей, но способной давать разумные количественные оценки наблюдаемых закономерностей. В работе [1]

предлагаются более сложные механизмы подавления прорастания микротрубок в эпитаксиальный слой. К сожалению, для теоретического построения таких моделей в настоящее время не хватает экспериментальной информации.

Работа выполнена в рамках программы Президиума РАН „Квантовая физика конденсированных сред“, ведомственной целевой программы „Развитие научного потенциала высшей школы“ (2009–2010) Министерства образования и науки РФ № 2.1.1/2503 и поддержана грантом РФФИ (проект № 07-0200636а).

Список литературы

- [1] М.Г. Мынбаева, П.Л. Абрамов, А.А. Лебедев, А.С. Трегубов, Д.П. Литвин, А.В. Васильев, Т.Ю. Чемякова, Ю.Н. Макаров. ФТП, **45** (6), 847 (2011).
- [2] А.А. Лебедев, С.Ю. Давыдов. ФТП, **39**, 296 (2005).
- [3] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев. ФТП, **41**, 641 (2007).
- [4] А.А. Лебедев. ФТП, **33**, 769 (1999).
- [5] N.S. Savkina, A.A. Lebedev, A.S. Tregubova, M.P. Scheglov. Mater. Sci. Forum, **338–342**, 509 (2000).
- [6] N.S. Savkina, A.S. Tregubova, M.P. Scheglov, G. Mosina, V.A. Soloviev, A. Volkova, A.A. Lebedev. Mater. Sci. Eng., B, **91**, 317 (2002).
- [7] 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. J. Mater. Res., **9**, 940 (1994).
- [8] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, Н.С. Савкина, М. Savajarvi, R. Yakimova. ФТП, **39**, 153 (2004).

Редактор Л.В. Беляков

Vacancy model of micropipes annihilation in the silicon carbide epitaxial layers

S.Yu. Davydov, A.A. Lebedev

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

Abstract Within the scope of the earlier proposed vacancy model of the SiC heteropolytype epitaxy (A.A. Lebedev, S.Yu. Davydov, Phys. Tech. Poluprov., **39**, 296 (2005); **41**, 641 (2007)) the kinetic processes of the annihilation (i.e. healing by the matrix atoms) of micropipe, that penetrates the growing epitaxial layer from the substrate are considered. The analytical relations between the epitaxial layer growth rate, vacancies lifetime and the depth of the defective layer were obtained. Both types of vacancies (V_C and V_{Si}) have been taken into account. The simplified linear model which permits to find the connection between the micropipe diameter r_0 and the defective layer depth l^* is also formulated. It was found that $l^* = r_0(G/g)$, where G is the epitaxial layer growth rate and g is the vacancy velocity, which gives for our experimental conditions that $l^* \approx 6r_0$.