

# Термодесорбция кремния с текстурированных лент тантала

© В.Н. Агеев, Е.Ю. Афанасьева, Н.Д. Потехина, А.Ю. Потехин

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

(Поступила в Редакцию 12 мая 1999 г.)

Изучалось взаимодействие Si с Ta методами оже-спектроскопии и температурно-программируемой десорбции (ТПД). Показано, что при монослойном покрытии адатомы Si начинают проникать в объем подложки при  $T \geq 1400$  К. Форма спектра и кривые отжига могут быть объяснены влиянием латерального отталкивания Si-Si в адслое не только на десорбцию, но и на уход Si в объем. Из анализа экспериментальных данных были определены некоторые соотношения между кинетическими параметрами. Их использование в численном расчете на основе ранее предложенной модели позволило определить (путем сравнения расчета с опытом) кинетические параметры всех процессов взаимодействия Si с подложкой из Ta при ТПД (десорбция, уход в объем, диффузии и выхода Si на поверхность). Показано, что удовлетворительное описание эксперимента получается только в предположении, что диффузия в конце ТПД после достижения максимума происходит лишь в пределах тонкого слоя вблизи поверхности, поэтому атомы Si быстрее выходят на поверхность и десорбируются, чем диффундируют в объем. Это означает, что слой вблизи поверхности при высоких температурах во время ТПД имеет нарушенную структуру по сравнению с начальной структурой Ta.

Работа выполнена в рамках программы "Атомные поверхностные структуры" (проект № 4.5.99).

Контакты "тугоплавкий металл-кремний" являются перспективными элементами высокотемпературной микроэлектроники. Однако процессы формирования этих контактов еще недостаточно изучены. Обычно с этой целью изучается система: полупроводник с нанесенным на него слоем металла [1]. В нашей лаборатории исследуются системы из металла с нанесенным на него слоем полупроводника. Это позволяет выявить новые аспекты процессов формирования приповерхностных слоев в области контакта. Данная работа продолжает серию работ, выполненных авторами по изучению взаимодействия Si с тугоплавкими металлами W, Ir, Nb, Ta [2-8] методами оже-электронной спектроскопии и температурно-программируемой десорбции (ТПД). Взаимодействие Si с Ta изучалось в работе [9] методом фотоэлектронной спектроскопии, а диффузия кремния в тантал и силицидообразование изучены с помощью рентгеновского анализа в работе [10].

В настоящей работе измерены спектры ТПД, а также оже-сигналы и полное количество Si, оставшегося в подложке после отжига танталовой ленты с монослоем кремния на поверхности. Эти данные сравниваются с результатами расчета модельной системы, рассмотренной в работах [11,12], где учтены процессы проникновения адатомов в объем металла, их диффузия в объеме и выход на поверхность при ТПД и во время отжига. Сравнение модельного расчета с результатами измерений позволяет определить константы скоростей всех протекающих в системе процессов, а также уточнить их физический смысл.

## 1. Методы исследования

Измерения проводились методом ТПД с регистрацией продуктов десорбции времяпролетным масс-спектрометром. Давление остаточных газов в приборе составляло  $10^{-10}$  Торр. Абсорбентом служила

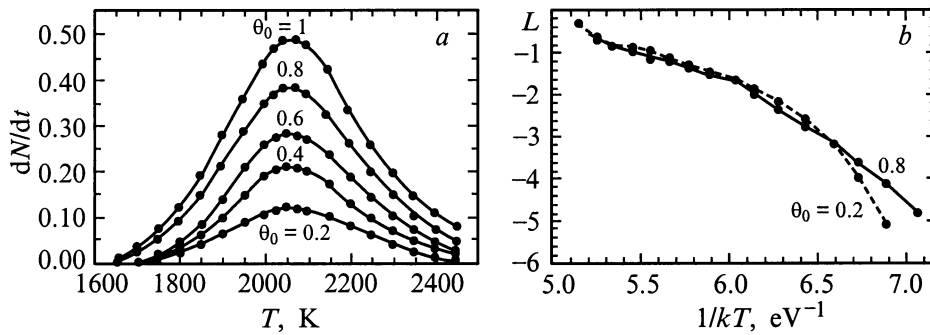
текстурированная танталовая лента с преимущественным выходом на поверхность грани (100) с размером  $0.01 \times 1.5 \times 30$  mm, расположенная в зоне прямой видимости источника ионов масс-спектрометра. Очистку ленты от углерода проводили по стандартной методике путем отжига в кислороде с последующим температурным прогревом.

Кремний напылялся из штабиков размерами  $1 \times 1 \times 30$  mm. Штабики укрепляли параллельно ленте из Ta и нагревали постоянным током. Температуру ленты определяли по зависимости сопротивления от температуры. Градуировку этой зависимости осуществляли с помощью оптического микропирометра. Ленту Ta нагревали пропусканием постоянного тока. Зависимость температуры ленты от времени в процессе "вспышки" была линейной. Поток атомов Si регистрировали по току ионов  $Si^+$ , которому в масс-спектре соответствовала линия 28. Поток атомов Si на ленту калибровали методом "кварцевых весов".

Опыты проводили следующим образом. Ленту Ta прогревали при 2600 К в течение нескольких секунд. Затем температуру ленты понижали до комнатной, напыляли Si в течение различных интервалов времени и производили "вспышку". Отжиг пленки с монослоем кремния, нанесенным при  $T = 300$  К, проводили в нескольких температурных точках  $T_i$  в интервале температур 1300-1800 К в течение 1 min. Предварительно было установлено отсутствие десорбции Si с обратной стороны ленты как во время "вспышки", так и при отжиге ленты с нанесенным на одну сторону кремнием.

## 2. Результаты измерений

На рис. 1, а представлены спектры ТПД для скорости нагрева  $\beta = 200$  К · с<sup>-1</sup> и различных начальных степеней покрытия  $\theta_0$  Ta(100) кремнием при  $\theta_0 \leq 1$ .



**Рис. 1.** Измеренные спектры ТПД Si/Ta для начальных покрытий Si  $\theta_0 = 0.2; 0.4; 0.6; 0.8; 1.0$  (a); зависимость функции  $L = \ln(N^{-1}dN/dt)$  от  $(kT)^{-1}$  для  $\theta_0 = 0.2$  (штриховая линия) и  $0.8$  (сплошная линия) (b).

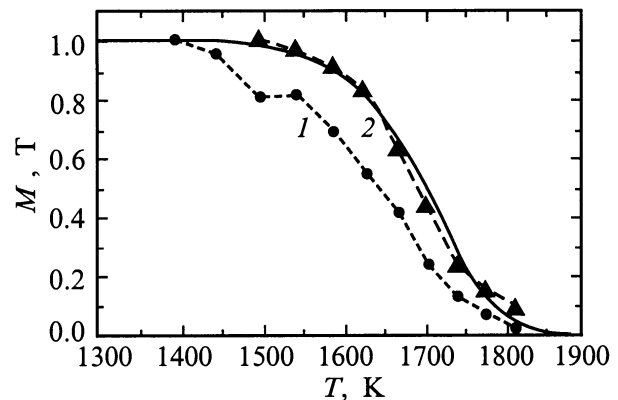
Для всех  $\theta_0$  на рис. 1, a наблюдается один пик ТПД. Положение максимума и полуширина пика не меняются с ростом  $\theta_0$ , что обычно характерно для одноатомной десорбции без латеральных взаимодействий в адслое и без диффузии адчастиц в объеме. Тогда кривые ТПД описываются уравнением Аррениуса с первым порядком десорбции. В нашем случае однако зависимость  $L(1/kT) = \ln(N^{-1}dN/dt)$ , график которой для двух  $\theta_0$  приведен на рис. 1, b, не аппроксимируется прямой линией, а значит, не описывается уравнением Аррениуса. Наклон начальных прямых участков на этом графике (для  $T \lesssim 1800$  К, т.е.  $1/kT \gtrsim 6.4$  eV $^{-1}$ ) уменьшается с ростом покрытия от  $E^* \simeq 5.4 \pm 0.2$  eV при  $\theta_0 = 0.2$  до  $E^* \simeq 3.5 \pm 0.2$  eV при  $\theta_0 = 0.8$ . При более высоких температурах зависимость кривых  $L(1/kT)$  от  $\theta_0$  исчезает, а их наклон уменьшается по мере роста температуры до 2200 К.

Поскольку спектры ТПД для  $\theta_0 \leq 1$  не описываются уравнением Аррениуса с первым порядком десорбции, то для их объяснения необходимо привлечь другие процессы, например, возможность диффузии Si в объем танталовой ленты при ТПД. Для проверки такой возможности мы изучали зависимость оже-сигнала кремния от температуры отжига  $T_i$  монослойной пленки Si на Ta. На рис. 2 через экспериментальные точки пунктиром проведены кривые отжига, дающие зависимость интенсивности оже-сигнала (кривая 1) и полного количества кремния, оставшегося в системе после отжига (кривая 2). Сплошная кривая дается теоретической аппроксимацией, обсуждаемой в разделе 3.

Уменьшение оже-сигнала  $I_A(T)$  (кривая 1), пропорционального количеству кремния в приповерхностных слоях, происходит с ростом  $T_i$ , как за счет десорбции Si во время отжига, так и за счет его диффузии в объем тантала. Уменьшение  $M(T_i)$  — полного количества Si, оставшегося в системе, — происходит только за счет десорбции во время отжига и измеряется методом ТПД. Из сравнения кривых 1, 2 на рис. 2 видно, что уменьшение количества Si в приповерхностной области происходит раньше (при  $T_i \geq 1400$  К), чем начинается десорбция и спад  $M(T_i)$  (при  $T_i \geq 1500$  К). Это означает, что в диапазоне  $1400 \leq T_i \leq 1500$  К существует только

диффузия Si в объем подложки, а при  $T_i \geq 1500$  К одновременно с диффузией Si в объеме происходит и его десорбция с поверхности Ta. До температуры  $T_i \leq 1400$  К монослой Si на Ta устойчив по отношению к обоим процессам.

На рис. 3 показаны спектры ТПД для больших покрытий,  $\theta_0 > 1$ . Начальные участки ТПД спектров для  $\theta_0 = 1.2$  и  $1.6$  (кривые 1, 2) отличаются от таковых для  $\theta_0 > 2$  (кривые 3–5). При дальнейшем увеличении покрытия фронты термодесорбционных кривых 3–5 совпадают, а максимумы смещаются с ростом  $\theta_0$  в область высоких температур (ВТ). Это свидетельствует о нулевом порядке десорбции, характерном для десорбции из толстого слоя адсорбата. Действительно, график  $\ln(N^{-1}dN/dt)$  в зависимости от  $(kT)^{-1}$  в этом случае удовлетворительно изображается прямой, наклон которой дает  $E^* = 5.4 \pm 0.2$  eV. Известно, что при напылении Si на Ta в диапазоне температур  $1300 < T \leq 1600$  К до начальных концентраций  $\theta_0 < 2$  наблюдается накопление кремния в приповерхностной области с последующим образованием в этой области силицида  $Ta_5Si_3$  [8]. Если же концентрация напыленного Si превысит  $\theta_0 \simeq 2$ , то в приповерхностной области происходит структурный фазовый переход от  $Ta_5Si_3$  к



**Рис. 2.** Изменение оже-сигнала (1) и полного количества  $M(T)$  Si (2) в пластине Ta после отжига в течение 60 s в зависимости от температуры отжига.

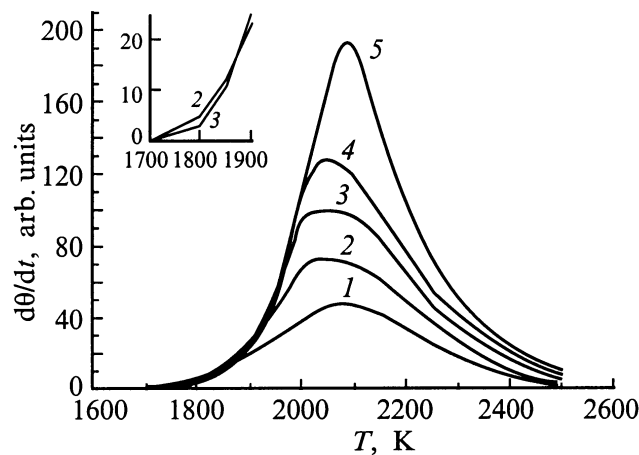


Рис. 3. Спектры ТПД Si/Ta при больших степенях напыления Si:  $\theta_0$ : 1 — 1.2; 2 — 1.6; 3 — 2.0; 4 — 2.4; 5 — 3.2.

Ta<sub>4</sub>Si. Поэтому различия в начальных участках ТПД спектров для  $\theta_0 < 2$  и  $\theta_0 > 2$ , по-видимому, связаны с десорбцией Si из различных силицидов: Ta<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> и Ta<sub>4</sub>Si. При этом резко увеличивается скорость растворения Si сквозь слой силицида [8].

При  $\theta_0 \geq 2$  фронты спектров ТПД совпадают, и максимум смещается в область высоких температур. Независимость скорости десорбции от покрытия связана здесь, вероятно, с десорбцией Si из силицида Ta<sub>4</sub>Si. Энергия активации десорбции, полученная из зависимости  $L(1/kT)$ , совпадает при этом с энергией десорбции при малых  $\theta_0$ ,  $E_d = 5.4 \pm 0.2$  eV, что указывает на наличие небольшой поверхностной концентрации атомов Si в процессе испарения силицида.

Следует отметить, что если температура  $T_{ads}$ , при которой производилось напыление Si на Ta, меньше 1300 K, то форма спектров ТПД в отличие от Si на W при  $\theta_0 > 1$  [4] не зависит от  $T_{ads}$  как при  $\theta_0 \leq 1$ , так и при  $\theta_0 > 1$ , хотя проникновение Si в Ta при  $\theta_0 > 1$  начинается уже при  $T > 700$  K [8]. Это означает что окончательный профиль концентрации Si в объеме Ta устанавливается за время "вспышки".

### 3. Сравнение результатов измерений с модельными расчетами спектров ТПД

Из приведенных на рис. 1–3 результатов следует, что процесс ТПД атомов Si с поверхности Ta(100) сопровождается проникновением Si в объем подложки, которое начинается раньше, чем десорбция из адслоя. Уменьшение наклона начальных участков графиков  $L(1/kT)$  на рис. 1, b при увеличении  $\theta_0$  свидетельствует об отталкивательном взаимодействии между атомами Si на поверхности Ta(100), аналогичном латеральному взаимодействию Si–Si на поверхности W(100) [4].

Таким образом, при описании спектров ТПД из субмонослойных пленок кремния на поверхности Ta(100) необходимо учитывать как процессы диффузии Si в объем подложки с его обратным выходом на поверхность во время "вспышки", так и латеральное взаимодействие в адслое. Расчет модельной системы для описания спектров ТПД в этих условиях был выполнен в работах [11,12]. Там рассматривалась симметричная пластина толщиной  $2l$ , на обе стороны которой нанесен слой адсорбата с начальным покрытием  $\theta_0$ . Предполагалось, что процессы диффузии и десорбции начинаются лишь при  $T(t) \geq T_0$ . В начальный момент объем свободен от частиц. В модели (рис. 4) выделен первый подповерхностный слой, который служит границей остального объема, рассматриваемого как континуум. Движение частиц в объеме характеризуется коэффициентом диффузии  $D = D_0 \exp(-E_m/kT)$ . В работе [11] записана система уравнений для численного решения задачи об изменениях концентрации частиц в адслое, приповерхностном слое и в объеме во время ТПД при

$$T(t) = T_0 + \beta t. \quad (1)$$

Рассматривались случаи с различным соотношением между константами скоростей десорбции  $k_d$ , перехода из адслоя в приповерхностный слой  $k_1$  и обратно  $k_2$  и коэффициентом диффузии  $D(T)$ .

Позже аналогичная задача была сформулирована в работе [13], где диффузия в объем учитывалась при напылении адсорбата. Было показано, что чем медленнее идет напыление, тем выше в спектре диффузионный максимум в области ВТ. В наших работах предполагалось, что начальное покрытие задано и влияние диффузии изучалось лишь во время ТПД. Но в отличие от [13] в работе [11] учтено изменение концентрации в подповерхностном слое на границе объема с адслоем вместо предположения о квазистационарности потока

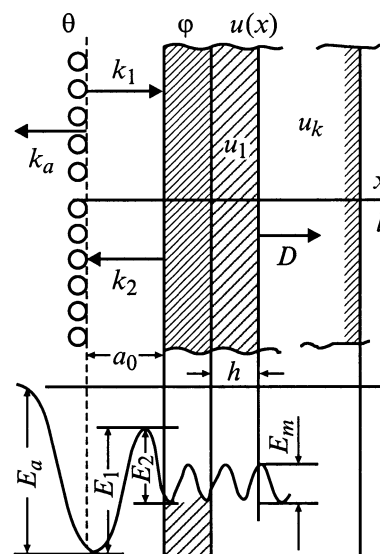


Рис. 4. Схематическая модель изучаемой системы.

частиц на границе. Одной из целей нашей работы [11] как раз и было определение условий формирования квазистационарного потока на границе объемной среды. Было показано, что это происходит лишь в конце процесса ТПД, после достижения максимума в спектре. Кроме того, в работе [12] в отличие от [13] было учтено влияние латеральных взаимодействий в адслое на спектры ТПД.

При отсутствии латеральных взаимодействий константы скорости всех процессов подчиняются уравнению Аррениуса

$$k_i(T) = k_i^0 \exp(-E_i/kT), \quad (2)$$

где  $k_i^0$  — предэкспоненты,  $E_i$  — энергии активации соответствующего процесса. Латеральные взаимодействия в адслое приводят к зависимости величин  $k_d$  и  $k_1$  от покрытия  $\theta(t)$ . Мы брали эту зависимость из теории решеточного газа [14,15]. Спектр ТПД определяется потоком десорбирующихся частиц

$$J(t) = -dN/dt = N_s k_d(T(t))\theta(t), \quad (3)$$

(где  $N(t) = N_s\theta(t)$  — полное число частиц в половине пластины,  $N_s$  — число мест адсорбции на  $1 \text{ cm}^2$ ), и может иметь один, два и три максимума [11,12]. Один пик в спектре при наличии латерального отталкивания в адслое может остаться лишь в том случае, когда отталкивание влияет не только на скорость десорбции, но и на уход частиц в объем, который при этом начинается раньше, чем десорбция.

Для предварительной оценки пределов изменения параметров, входящих в численный расчет, использовались следующие результаты.

1) Наклон графика  $L(1/kT) = \ln(N^{-1}dN/dt)$  (рис. 1, б) при малых степенях покрытия  $\theta_0 \rightarrow 0$  определяет величину энергии активации десорбции,

$$E_d \simeq 5.4 \pm 0.2 \text{ eV}. \quad (4)$$

2) Изменение наклона графика  $L(1/kT)$  с ростом  $\theta_0$  дает оценку энергии  $w$  латерального взаимодействия из соотношения

$$E_i(\theta) \simeq E_i(0) - z\theta w, \quad (5)$$

где  $z$  — число ближайших соседей в адслое,  $E_i$  — это  $E_d$  или  $E_1$ .

Для определения  $w$  используем  $E_d(0)$  из (4) и  $E_d(1) \simeq 4.5 \text{ eV}$ . Последнюю величину мы взяли близкой к теплоте сублимации Si, так как определение  $E_d(1)$  из наклона графиков  $L(1/kT)$  не будет корректным, поскольку ТПД происходит, как показано выше, после частичного истощения адслоя за счет диффузии в объем. Если бы десорбция происходила при  $\theta \simeq 1$ , то латеральное отталкивание в адслое должно было бы приводить к двум пикам в спектре ТПД [14,15], в то время как в случае Si/Ta проявляется только высокоэнергетический пик, соответствующий малым покрытиям. Тогда из уравнения (5) при  $z = 4$  получим оценку

$$w \simeq 0.25 \pm 0.05 \text{ eV}. \quad (6)$$

3) Предэкспоненты десорбции оцениваем из положения максимума спектра ТПД,  $T_m \simeq 2060 \text{ K}$  в соответствии с уравнением Редхеда [16], полученным без учета диффузии в объем

$$E_d/(kT_m) \simeq \ln(k_d^0 T_m/\beta) - 3.64. \quad (7)$$

Здесь использованы соотношения (1) и (2) для зависимостей  $k_d(T)$  и  $T(t)$ .

4) Разница температур начала ухода адатомов Si в Та ( $T_1 = 1400 \text{ K}$ ) и начала десорбции ( $T_2 = 1500 \text{ K}$ ) дает нижнюю границу для разности  $E_d$  и  $E_1$  на основе соотношения  $k_1(1400 \text{ K}) \simeq k_d(1500 \text{ K})$ . Используя закон Аррениуса (2) и подставляя в него зависимость энергий активации  $E_d$  и  $E_1$  от покрытия (5), а также учитывая, что при  $T_2 = 1500 \text{ K}$  в объем ушло примерно  $0.1\theta_0$  (рис. 3), получим уравнение

$$E_1 \simeq (E_d - 0.9\theta_0 z w) \frac{T_1}{T_2} + \theta_0 z w - kT_1 \ln(k_d^0/k_1^0), \quad (8)$$

из которого найдем, что при  $k_d^0/k_1^0 \simeq (1-10)$ ;  $w = 0.3$ ,  $z = 4$ ,  $\theta_0 = 1$

$$\delta E = E_d - E_1 \geq (0.4-0.8) \text{ eV}. \quad (9)$$

5) Из теории отжига субмонослоя при наличии диффузии в объем [17] следует, что изменение оже-сигнала примесных частиц в поверхностном слое в начальные моменты отжига при  $t < k_d^{-1}(T)$  определяется уравнением

$$I_A(t, T) \simeq I_0 \lambda \theta_0 [1 - b(T)\sqrt{t}], \quad (10)$$

$$b(T) = k_1(T)\sqrt{D}/[a_0 k_2(T)],$$

где  $a_0$  — постоянная решетки Та,  $\lambda$  — глубина проникновения оже-сигнала примеси, который спадает с ростом ее расстояния  $x$  от поверхности по закону  $I_A(x) = I_0 \exp(-x/\lambda)$ , а  $I_0$  — оже-сигнал от монослоя. Из сравнения эксперимента для Si/Ta [7] с выражением (10) в работе [17] получены соотношения

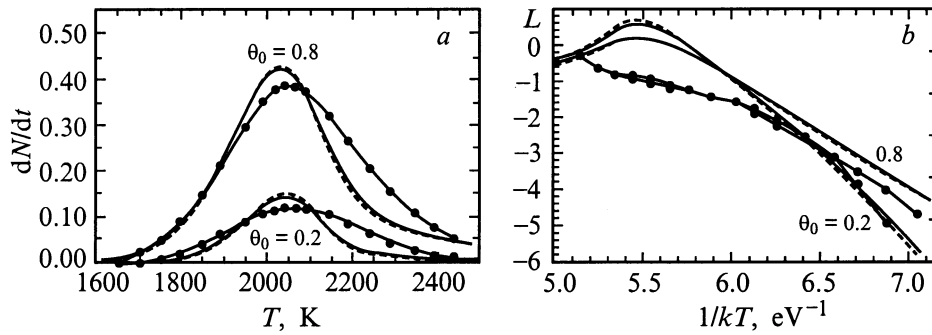
$$E_1 - E_2 \simeq (1.9 - E_m/2) \text{ eV}; \quad k_2^0/k_1^0 \simeq 5, \quad (11)$$

где  $E_2$  — энергия активации обратного выхода частиц из объема на поверхность, а  $E_m$  — энергия активации объемной миграции.

При выводе уравнений (10)–(11) не была учтена зависимость от  $\theta$  в коэффициентах  $k_d(\theta, T)$  и  $k_1(\theta, T)$ . Поэтому оценки (11) являются предварительными и могут измениться при учете этих зависимостей.

6) На эксперименте не наблюдалось выхода частиц на обратную сторону ленты толщиной  $0.01 \text{ mm}$ . Распределения частиц в объеме, вычисленные при различных коэффициентах диффузии с параметрами, отвечающими условиям (1)–(5), показали, что атомы Si не выходят на обратную сторону ленты ни при отжиге, ни при ТПД, если коэффициент диффузии ограничен неравенством

$$D(T) \geq 10^{-4} \exp(-1.5 \text{ eV}/kT). \quad (12)$$



**Рис. 5.** Результат расчета спектра ТПД (а) и функции  $L(1/kT)$  (б) с параметрами I (сплошные кривые) и II (штриховые кривые) из табл. 1 для  $l_1 = l = 0.001$  см. Приведены также результаты измерений (точки, соединенные сплошными линиями) для  $\Theta_0 = 0.2; 0.6; 1.0$  (а) и  $\theta_0 = 0.2; 0.8$  (б).

На основании этих соображений получаем набор исходных параметров, около которых производим добавочные небольшие вариации для более точного описания спектра ТПД (рис. 1) и кривых отжига (рис. 2). Исходный набор кинетических параметров при разных значениях  $D(T)$  приведен в табл. 1 (варианты I и II). Энергии активации указаны в eV, а предэкспоненты — в единицах  $10^{13} \text{ s}^{-1}$  для  $k_i^0$  и в  $\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  для  $D_0$ .

Вычисления с этими параметрами для  $l = 10^{-3}$  см показывают (рис. 5), что хотя расчет и передает главные особенности спектра, один максимум, положение и полуширина которого почти не меняются с изменением начального покрытия  $\theta_0$ , но при этом спектр оказывается несимметричным в отличие от эксперимента, а скорость отжига при ВТ значительно меньше экспериментальной

**Таблица 1.** Варианты набора параметров, использованных в расчете

	I		II		III	
	$E_i$	$k_i^0$	$E_i$	$k_i^0$	$E_i$	$k_i^0$
$k_d$	5.4	5	5.5	8	5.3	7
$K_1$	4.6	1	4.7	1	4.4	5
$k_2$	3.4	5	3.5	5	3.0	7
$D$	$2.1 \cdot 10^{-3}$		$1.8 \cdot 10^{-4}$		$1.6 \cdot 2 \cdot 10^{-4}$	
$l_1$	0.15l		0.12l		0.25l	

**Таблица 2.** Доля Si, оставшегося в подложке после отжига в течение 60 с при разных  $T_i$  (результаты измерений и вычислений с наборами параметров I и III из табл. 1)

$T_i, \text{K}$	Эксперимент	I		III
		$l_1 = l$	$l_1 = 0.15l$	$l_1 = 0.25l$
1400	1.0	0.994	0.99	1.0
1500	1.0	0.988	0.98	0.98
1600	0.80–0.89	0.92	0.90	0.88
1700	0.38–0.46	0.72	0.60	0.52
1800	0.10	0.36	0.13	0.06

(табл. 2,  $l_1 = l$ ). Это означает, что в расчете более, чем в 3 раза завышено количество кремния, проникшего в объем и оставшегося в нем после отжига при  $T \geq 1700$  К, независимо от величины коэффициента диффузии, удовлетворяющего условию (12). Вариации параметров не устраняли этого расхождения с экспериментом. Функция  $L(1/kT)$  (рис. 5, б) в расчете перестает расти и понижается при  $T \geq T_m$ , что, как показано в [11,12], также свидетельствует о завышении роли диффузии в объеме для нашей модели по сравнению с экспериментом.

Восстановить симметрию вычисленных спектров можно было лишь введя предположение о резком уменьшении скорости диффузии в объеме за пределами некоторого слоя толщины  $l_1 \ll l$  вблизи поверхности. При этом все варианты параметров из табл. 1 дают симметричные спектры, аналогичные показанному на рис. 6, где представлены результаты расчета с параметрами вариантов I и II при  $l_1 < l$ . Ход функции  $L(1/kT)$  (рис. 6, б) также больше похож на ход экспериментальных графиков. Отжиг при ВТ ускоряется, почти устраняя расхождение с экспериментом, как показывает табл. 2. Отметим, что при такой модификации теоретической модели отпадает ограничение (12).

Еще лучше подгонка к эксперименту получена некоторой вариацией констант (вариант III в табл. 1) (рис. 7). Отклонения от условий (11) в этом наборе могут быть следствием приближений, сделанных в работе [17], а также результатом связи между параметрами  $E_i$  и  $k_i^0$ , не позволяющей определять их однозначно порознь. Взаимосвязь параметров приводит к возможности описывать эксперимент различными наборами параметров. Однако все найденные нами наборы не очень сильно отличаются друг от друга и для взаимодействия субмонослоя Si с подложкой из Ta параметры ограничены следующими рамками величин (в eV для энергий активации, в  $10^{13} \text{ s}^{-1}$  для  $k_i^0$ ):

$$\begin{aligned}
 E_d &\simeq 5.3\text{--}5.5; & k_d^0 &\simeq 5\text{--}10; \\
 E_1 &\simeq 4.4\text{--}4.7; & k_1^0 &\simeq 1\text{--}8; \\
 E_2 &\simeq 3.0\text{--}3.5; & k_2^0 &\simeq 3\text{--}7; \\
 E_m &\simeq 1.6\text{--}2.1; & D_0 &\simeq 10^{-4}\text{--}10^{-3} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}.
 \end{aligned} \quad (13)$$

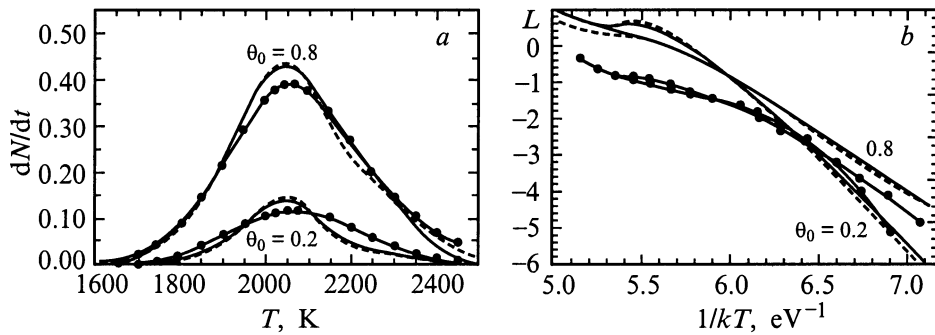


Рис. 6. То же, что на рис. 5, но при  $l_1 < l$  из табл. 1.

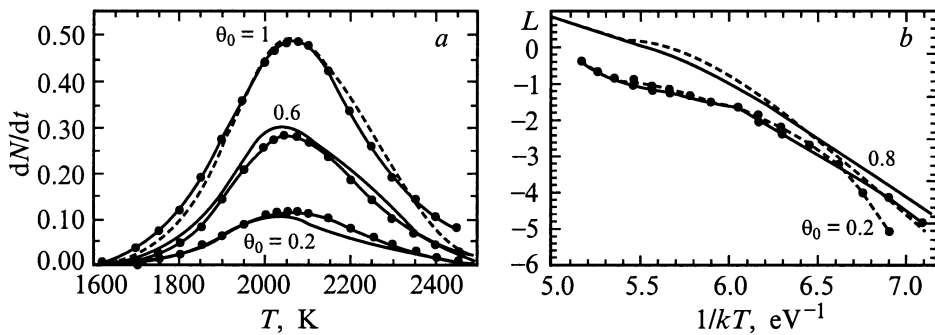


Рис. 7. Вычисленные спектры ТПД (а) и функция  $L(1/kT)$  при наборе параметров III из табл. 1 для  $\theta_0 = 0.2; 0.6; 1.0$  (а) и  $\theta_0 = 0.2; 0.8$  (б). Результаты измерений даны точками, соединенными сплошными линиями.

При этом в нашей модели предполагается, что в объеме пластины скорость диффузии спадает до нуля за пределами тонкого слоя вблизи поверхности. Для реальной системы это означает, что скорость диффузии примесных частиц в объеме зависит от концентрации примеси или от расстояния до поверхности. Мы моделировали эту зависимость ступенчатым спадом  $D(T)$  до 0 при  $x \geq l_1 = (0.12-0.25)l$ , где  $l$  — толщина пластины из тантала. Грубость этой модели отчасти обуславливает неточное описание вычисляемых зависимостей  $dN/dt$  и  $L(1/kT)$  при разных  $\theta_0$ . В частности, ступенчатый спад коэффициента диффузии приводит к более резкому спаду ВТ ветви спектра по сравнению с экспериментом. Ход экспериментального графика  $L(1/kT)$  также ближе к модели со ступенчатой зависимостью коэффициента диффузии  $D(x)$ , чем к модели без такой зависимости (рис. 5,6). На рис. 7 наклоны различных участков графика  $L(1/kT)$ , определяющие эффективные энергии активации  $E_i$ , удовлетворительно согласуются с экспериментом. Остающиеся количественные расхождения могут быть связаны с неточностью как модели, так и измерений. Данные по отжигу, рассчитанные по данной модели (последний столбец табл. 2 и сплошная кривая на рис. 2), также неплохо согласуются с экспериментом.

Проведенные вычисления показали, что совокупность требований (4)–(12) определяет довольно узкие рамки

изменения параметров скоростей реакций, представленные соотношениями (13).

Таким образом, в настоящей работе показано, что во время температурной "вспышки" кремний из субмонослоя раньше проникает в объем подложки (при  $T \geq 1400$  К), чем десорбируется (при  $T \geq 1500$  К). Это объясняет, почему в спектре ТПД кремния с поверхности тантала имеется лишь один максимум, несмотря на существование латерального отталкивания в адслое.

Из сравнения расчета с экспериментом следует, что наблюдаемая колоколообразная форма спектра почти без диффузионного "хвоста", возможна лишь при выделении вблизи поверхности некоторого слоя с повышенной скоростью диффузии в нем по сравнению с остальным объектом. Это может быть связано с образованием слоя силицида при  $T \geq 1600$  К, сквозь который и осуществляется ускоренная диффузия в объем, а также более быстрый выход Si на поверхность через слой разрушающегося силицида, чем проникновение далее в глубь чистого Ta. Поэтому модель с "отражением" диффундирующих частиц от границы некоторого слоя вблизи поверхности лучше передает форму спектра ТПД и скорость отжига, чем с постоянным коэффициентом диффузии по всей толщине ленты.

Определены приближенные значения энергий активации и предэкспонент в скоростях реакций всех процессов взаимодействия адатомов Si с подложкой из Ta.

**Список литературы**

- [1] G. Ross. Surf. Rep. **7**, 1 (1987).
- [2] В.Н. Агеев, Е.Ю. Афанасьева, Н.Р. Галль, С.Н. Михайлов, Е.В. Рутыков, А.Я. Тонтегоде. Поверхность **5**, 7 (1987).
- [3] В.Н. Агеев, Е.Ю. Афанасьева, Н.Р. Галль, С.Н. Михайлов, Е.В. Рутыков, А.Я. Тонтегоде. Письма в ЖТФ **12**, 9, 565 (1986).
- [4] В.Н. Агеев, Е.Ю. Афанасьева. Поверхность **7**, 30 (1987).
- [5] Е.Ю. Афанасьева, Н.Д. Потехина, С.М. Соловьев. ФТТ **37**, 2, 463 (1995).
- [6] В.Н. Агеев, Е.Ю. Афанасьева, С.М. Соловьев, А.К. Григорьев. ФТТ **35**, 2, 481 (1993).
- [7] N.R. Gall, E.V. Ryt'kov, A.Ya. Tontegode, M.M. Usufov. Phys. Low-Dim. Struct. **4/5**, 75 (1996).
- [8] В.Н. Агеев, Е.Ю. Афанасьева. ФТТ **39**, 8, 1484 (1997).
- [9] T.A. Nguyen Tau, V. Azizan, J. Derrien. Surf. Sci. **189/190**, 339 (1987).
- [10] G.J. Campisi, A.J. Bevolo, H.R. Shanks, H.A. Schmidt. J. Appl. Phys. **53**, 1714 (1982).
- [11] В.Н. Агеев, А.Ю. Потехин, Н.Д. Потехина. Поверхность **1**, 31 (1987).
- [12] В.Н. Агеев, А.Ю. Потехин, Н.Д. Потехина. Поверхность **1**, 5 (1991).
- [13] M. Mavrikakis, J.M. Schwank, Y.L. Gland. Surf. Sci. **355**, 385 (1996).
- [14] D.L. Adams. Surf. Sci. **42**, 12 (1974).
- [15] V.P. Zhdanov. Elementary Physical Chemical Processes on Solids Surfaces. Plenum, N. Y. (1991).
- [16] P.A. Redhead. Vacuum **12**, 2, 203 (1962).
- [17] Н.Д. Потехина. ФТТ (1999).