

Простая модель для расчета скорости роста эпитаксиальных слоев карбида кремния в вакууме

© С.Ю. Давыдов[¶], А.А. Лебедев, Н.С. Савкина, М. Suvajarvi*, R. Yakimova*

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

* Университет Линчепинга,
S-581 83 Линчепинг, Швеция

(Получена 29 декабря 2002 г. Принята к печати 3 июня 2003 г.)

В рамках простой модели, основанной на уравнении Гертца–Кнудсена, с учетом зависящего от температуры коэффициента прилипания, рассчитана зависимость скорости роста эпитаксиальных слоев карбида кремния в вакууме от температуры. Результаты расчета хорошо совпадают с экспериментальными данными.

Обычно метод сублимационной эпитаксии SiC используется для получения объемных кристаллов [1]. Процесс происходит в атмосфере инертного газа, за счет чего достигается скорость роста до нескольких см/ч. При эпитаксиальном росте тонких пленок возрастают требования к чистоте газа и к границе раздела слой–подложка, однако снижаются требования к скоростям роста (скорость 10 мкм/ч является приемлемой). Все это позволяет использовать метод сублимационной эпитаксии SiC и, в частности, метод эпитаксии в вакууме для получения приборных структур, например *pin*-диодов.

Моделирование эпитаксиального роста является весьма трудной задачей, так как необходимо учитывать множество физико-химических процессов и сложную геометрию реальных установок как и при моделировании роста из газовой фазы [2,3]. Как бы парадоксально это ни выглядело, но математическая модель роста в вакууме, где, казалось бы, все обстоит значительно проще по сравнению с транспортом выстраивающихся кристалл молекул в атмосфере инертного газа, разработана слабее всего. Дело в том, что инертный газ определенным образом выстраивает поток „рабочего вещества“, тогда как в вакууме имеет место стохастический процесс [4], моделируемый, как правило, по методу Монте-Карло. К счастью, однако, наряду со сложными численными расчетами, основанными на уравнениях гидродинамики, существуют упрощенные схемы, использующие уравнение Гертца–Кнудсена, согласно которому молярный поток вещества J определяется следующим выражением (см., например, [5–7]):

$$J = X(T)p(T),$$

$$X = (2\pi MRT)^{-1/2}, \quad (1)$$

где M — молярная масса переносимого вещества, R — универсальная газовая постоянная, T — температура, p — равновесное давление пара переносимого вещества. По сути дела уравнение Гертца–Кнудсена описывает скорость испарения в пустоту молекул твердого тела, т.е. число частиц, покидающих в единицу времени

единицу площади твердого тела [8]. Скорость роста G , определяемая (1), есть

$$G = \frac{M}{\rho} J, \quad (2)$$

где ρ — плотность растущего материала.

Следуя работе [5], для описания роста эпитаксиальных слоев карбида кремния введем коэффициент прилипания α , который, однако, будем полагать зависящим от температуры, считая, что для адсорбции атомов на поверхности подложки необходимо преодолеть некоторый потенциальный барьер E_a , т.е. используем модель, приведенную в работе [9] для описания роста кристаллов кремния и германия. Как и в [4–6,8], пренебрежем для простоты температурным градиентом в ячейке, полагая, что, хотя наличие градиента и является необходимым условием процесса роста, его влияние на скорость процесса мало. Тогда получим:

$$G = \frac{M_{\text{SiC}}}{\rho_{\text{SiC}}} X_{\text{SiC}}(T) p_{\text{SiC}}(T) \alpha(T),$$

$$X_{\text{SiC}} = (2\pi M_{\text{SiC}} RT)^{-1/2},$$

$$p_{\text{SiC}}(T) = B \exp(-Q/RT), \quad \alpha(T) = A \exp(-E_a/RT). \quad (3)$$

Здесь Q — теплота сублимации карбида кремния, A и B — коэффициенты. Из этих выражений мы и будем исходить в настоящей работе, посвященной расчету скорости роста эпитаксиальных слоев SiC на подложках SiC. Разумеется, мы отдаем себе отчет, что реально в процессе переноса участвуют не молекулы SiC, а SiC₂, Si, Si₂C, C (см., например, [6,7]). Однако в соответствии с моделью [5] будем для простоты пренебрегать этим обстоятельством.

Схема экспериментальной установки и конструкция ячейки роста подробно описаны в [10]. Отметим только, что моделирование выполняется для „открытой“ ростовой системы. Иными словами, часть молекул вещества покидает ростовую зону, не участвуя в массопереносе. Экспериментальная зависимость скорости роста эпитаксиальной пленки в такой системе от температуры роста представлена на рис. 1 (кривая 1). На этом же графике для сравнения приведена аналогичная зависимость для „квасизамкнутой“ системы (кривая 2), описанной в [11].

[¶] E-mail: sergei_davydov@mail.ioffe.ru

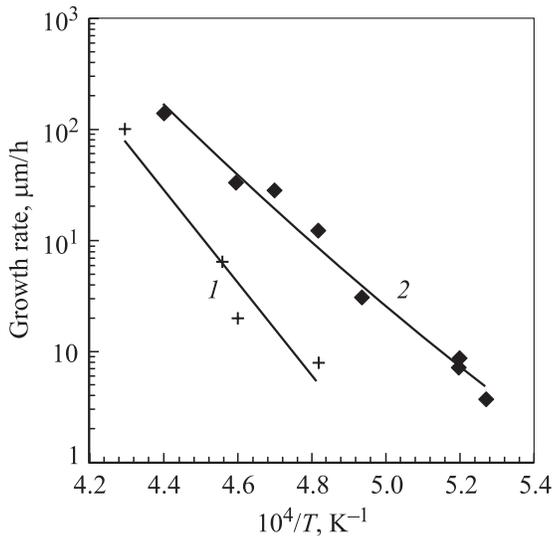


Рис. 1. Экспериментальные значения скорости роста слоев карбида кремния в функции от обратной температуры: 1 — [10], 2 — [11].

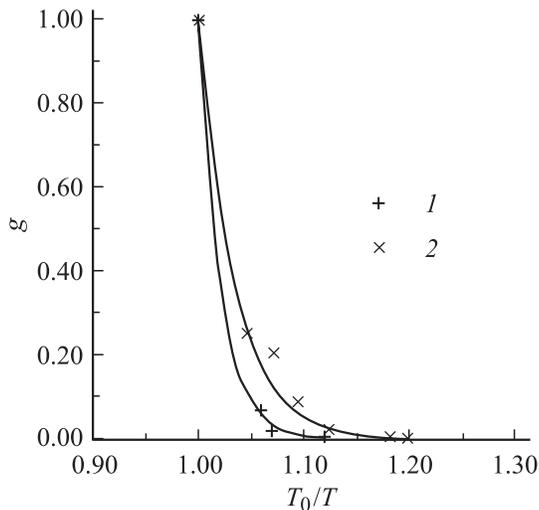


Рис. 2. Сопоставление результатов расчета приведенной скорости роста $g \equiv G/G_0$ в функции от приведенной обратной температуры T_0/T с экспериментальными данными: 1 — настоящая работа, $\omega = 48$, 2 — [12], $\omega = 30$.

Для теоретического описания экспериментальных данных удобно ввести безразмерную скорость роста $g \equiv G/G_0$, где G — скорость роста при температуре T , а G_0 — максимальная скорость роста 1000 мкм/ч, соответствующая температуре $T_0 = 2326$ К. Введя следующие безразмерные параметры:

$$\omega = \omega_q + \omega_a = \frac{Q + E_a}{RT_0} = \frac{Q}{RT_0} + \frac{E_a}{RT_0} \text{ и } \xi = \frac{T_0}{T} \geq 1 \dots, \quad (4)$$

получим

$$g \equiv G/G_0 = \sqrt{\xi} \cdot \exp[-\omega(\xi - 1)]. \quad (5)$$

На рис. 2 представлено сопоставление результатов расчета с экспериментальными данными. Данные расчета хорошо согласуются с экспериментом при $\omega = 48$ (кривая 1 — настоящая работа) и при $\omega = 30$ (кривая 2 — данные работы [12]).

Проанализируем полученный результат. Согласно данным работы [13], равновесное давление карбида кремния определяется параметрами $B = 4.3323 \cdot 10^{13}$ Па и $Q = 567.35$ Дж/моль = 5.88 эВ/молекула. Отсюда $\omega_q \equiv Q/RT_0 = 29.4$, тогда $\omega_a \equiv E_a/RT_0 = 18.6$. Из последнего равенства следует, что $E_a = 3.73$ эВ/молекула, что удовлетворительно согласуется с энергией связи (на одну связь) карбида кремния, равной 3.17 эВ [12]. Исходя из того, что $G_0 = 1000$ мкм/ч, найдем $A = 0.286 \cdot 10^8$, что при $T_0 = 2326$ К дает для коэффициента прилипания значение $\alpha = 0.24$. Следовательно, каждая четвертая молекула прилипает к подложке, что представляется вполне разумным.

Вторая группа экспериментов проводилась в квазизамкнутой системе. Рост проводился на кремниевой поверхности 6H-SiC. Поверхность подложки имела угол разориентации 3.5° в направлении $\langle 11\bar{2}0 \rangle$. Ростовой реактор состоял из кварцевой трубы и водоохлаждаемых стальных фланцев. Ростовая ячейка, источник роста и подложка находились внутри графитовой арматуры, которая нагревалась индукционной катушкой с использованием ВЧ генератора. Рост производился в диапазоне температур от 1700 до 1800°C. В случае использования поликристаллического SiC в качестве источника роста при низких давлениях скорость роста слоя определялась скоростью испарения источника [11]. Анализ параметров для квазизамкнутой системы при $T_0 = 2273$ К и $G_0 = 1394$ мкм/ч и тех же значениях B и Q , что и выше, дает: $\omega_q = 30$, $\omega_a = 0$ и $\alpha = 0.6$. Здесь особенно интересно то обстоятельство, что адсорбционный барьер отсутствует ($E_a = 0$), что и приводит к увеличению коэффициента прилипания в 2.5 раза и соответствующему увеличению скорости роста по сравнению с открытой системой. Эти различия связаны, по-видимому, с состоянием поверхности подложек и конструктивными особенностями установок.

Отметим, что, как и авторы работы [9], мы задавали коэффициент прилипания α чисто эмпирически, полагая, что для присоединения молекулы к поверхности требуется преодолеть определенный потенциальный барьер E_a . При высоких температурах такое приближение, по-видимому, приемлемо, так как учитывает увеличение вероятности захвата молекулы поверхностью с ростом T , что согласуется с результатами, полученными, например, в теоретических работах [14,15].

Авторы признательны В.В. Зеленину за полезное обсуждение.

Работа выполнена при поддержке грантов INTAS-01-0603 и NATO SfP N978011.

Список литературы

- [1] Yu.M. Tairov. In: *Electric refractory materials*, ed. by Y.K. Kumashiru, M. Dekker (N.Y., 2000) p. 409.
- [2] А.И. Жмакин, Ю.Н. Макаров, Д.Х. Офенгейм, М.С. Рамм. В сб.: *Вопросы математической физики и прикладной математики* (ФТИ РАН, СПб., 2001) с. 208.
- [3] M. Selder, L. Kadinsky, F. Durst. В сб.: *Вопросы математической физики и прикладной математики* (ФТИ РАН, СПб., 2001) с. 235.
- [4] K.F. Jensen. *Handbook of crystal growth* (Elsevier, 1994) v. 3.
- [5] T. Kaneko. *J. Cryst. Growth*, **69**, 1 (1984).
- [6] D.D. Avrov, A.S. Baskin, S.I. Dorozhkin, V.P. Rastegaev, Yu.M. Tairov. *J. Cryst. Growth*, 198/199, 1011 (1999).
- [7] Q.-S. Chen, H. Zhang, V. Prasad, C.M. Balkas, N.K. Yushin, S. Wang. *J. Cryst. Growth*, **224**, 101 (2001).
- [8] Л.Д. Ландау, Е.М. Лившиц. *Статистическая физика* (М., Наука, 1976) ч. 1, с. 281.
- [9] J.A. Bootsma, H.J. Gassen. *J. Cryst. Growth*, **10**, 223 (1971).
- [10] N.S. Savkina, A.A. Lebedev, D.V. Davydov, A.M. Strel'chuk, A.S. Tregubova, C. Raynaud, J.-P. Chante, M. L. Locatelli, D. Planson, J. Milan, P. Godignon, F.J. Campos, N. Mestres, J. Pascual, G. Brezeanu, M. Badila. *Mater. Sci. Eng. B*, **61–62**, 50 (2000).
- [11] M. Syväjärvi, R. Yakimova, M. Tuominen, A. Kakanakova-Georgieva, M.F. MacMillan, A. Henry, Q. Wahab, E. Janzén. *J. Cryst. Growth*, **197**, 155 (1999).
- [12] У. Харрисон. *Электронная структура и свойства твердых тел* (М., Мир, 1983) т. 1.
- [13] S.K. Lilov, I.Y. Yanchev. *Crystal Res. Technol.*, **28**, 495 (1993).
- [14] A. Harkmans, E.G. Overbosh, D.R. Olander, J. Los. *Surf. Sci.*, **54**, 154 (1976).
- [15] F.O. Goodman. *Surf. Sci.*, **92**, 185 (1980).

Редактор Л.В. Беляков

A simple model for growth rate calculation of silicon carbide epilayers in vacuum

S.Yu. Davydov, A.A. Lebedev, N.S. Savkina,
M. Syväjärvi*, R. Yakimova*

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

* Linköping University,
S-581 83 Linköping, Sweden

Abstract Within the frame of a simple model, based on Hertz-Knudsen equation with account of a temperature dependent sticking coefficient, the temperature dependence of silicon carbide growth rate in vacuum has been calculated. Calculation results are in good agreement with the experimental data.