

03,04,13

Особенности и механизмы роста пленок кубического карбида кремния на кремнии

© Л.К. Орлов^{1,2}, Э.А. Штейнман³, Т.Н. Смылова¹, Н.Л. Ивина¹, А.Н. Терещенко³

¹ Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия

² Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия

³ Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Московская обл., Россия

E-mail: orlov@imp.sci-nnov.ru

(Поступила в Редакцию 19 июля 2011 г.)

В окончательной редакции 20 сентября 2011 г.)

Рассматриваются механизмы и особенности роста слоев карбида кремния в методе вакуумной химической эпитаксии в интервале ростовых температур от 1000 до 700°С. На основании проведенных исследований спектров фотолюминесценции в ближнем инфракрасном диапазоне длин волн и данных масс-спектрометрического анализа изучена структура формируемого гетероперехода. Обнаружено значительное возрастание концентрации точечных дефектов и отсутствие выраженной дислокационной структуры в слое кремния, прилегающего к гетеропереходу 3C-SiC/Si. По данным морфологических исследований поверхности растущей пленки по аналогии с теорией термического окисления кремния построена теория карбидизации поверхностных слоев кремния. Отличительной особенностью рассмотренной модели является включение в нее встречных, от подложки к поверхности структуры, диффузионных потоков атомов кремния. Проведены оценки скорости роста пленок и энергии активации диффузионных процессов. Проведенные эксперименты в совокупности с разработанной моделью роста, объясняют наблюдаемые на практике образования пустот под формируемым карбидным слоем в матрице кремния и возможность формирования развитой морфологии поверхности (островковый рост пленки) даже в условиях использования в реакторе только одного потока углеводорода.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 08-02-97017р-поволжье и ФЦП „Научные и научно-педагогические кадры инновационной России“ на 2009–2012 гг.

1. Введение

Пленки кубического карбида кремния, выращиваемого на кремнии, в последнее десятилетие вызывают повышенный интерес не только благодаря их уникальным свойствам, но и вследствие интереса, проявляемого к гетеропереходу между кремнием и слоем карбида кремния. Особенно привлекательным представляется гетеропереход 3C-SiC/Si между низкотемпературной кубической фазой карбида кремния и кремнием в связи с просматриваемой перспективой использования данной гетеропары для создания высокоэффективного широкозонного эмиттера в кремниевых диодах [1,2] и гетеротранзисторе [3–5]. Проявляемое внимание к механизмам карбидообразования кремния в широком интервале температур обусловлено и стремлением совмещения кремниевой и углеродной технологий и нахождения условий, при которых возможно выращивание в едином технологическом цикле гетероструктур, содержащих в кремниевой матрице слои графена и мультиграфена [6]. Очевидно, что основным препятствием при решении этой задачи может стать высокая эффективность карбидизации поверхности кремния, наблюдаемая в условиях стандартных ростовых температур. В связи с интере-

сом, проявляемым к карбиду кремния в современной микроэлектронике, представляется важным изучение как особенностей роста пленок 3C-SiC на Si, особенно на начальной стадии карбидизации поверхностного слоя кремния, так и механизмов роста, ответственных за структуру выращиваемых слоев и за характеристики формируемого гетероперехода.

В настоящее время процесс предварительной карбидизации поверхности эпитаксиального кремния в потоке углеводородов является общепринятым способом формирования на кремнии тонкой подстилающей карбидной пленки. Последняя не только используется для подготовки поверхности к последующему эпитаксиальному росту карбидного слоя, например из смеси гидридов с углеводородами, но и формирует при определенных технологических условиях достаточно совершенную границу с кремнием в области гетероперехода [7]. В ранее выполненных нами работах [8–10] обсуждались главным образом состав, морфология, структура и излучательные в области ультрафиолетового диапазона частот характеристики пленок кубической фазы карбида кремния, выращиваемых на кремнии различной ориентации методом химической конверсии в вакууме. Настоящая работа в основной своей части направлена на изучение

оптическими методами структуры дефектов в окрестности формируемой гетерограницы и на разработку с использованием полученной информации модели роста карбидных слоев с целью лучшего понимания как основных механизмов роста пленок, так и наблюдаемых на внешней и внутренней границах слоя структурных и морфологических особенностей.

2. Методы выращивания и характеристики наноструктурированных карбидных пленок

Процесс карбидизации поверхности эпитаксиального кремния проводился в ростовой вакуумной установке [8] в температурном интервале от 1000 до 600°C. Формирование карбидного слоя даже в условиях пониженных ростовых температур $T_{гр} < 700^\circ\text{C}$ при относительно высоком давлении паров углеводорода в реакторе подтверждается данными рентгеноструктурного анализа, электронографии, электронной микроскопии, фото- и катодолуминесценции [8–10]. Не исключена, однако, в этих условиях и возможность формирования на поверхности кремния тонкого слоя твердого раствора $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$, особенно при использовании в качестве газофазного источника элементоорганических соединений [11].

Морфология карбидизированной поверхности кремния для образцов 3C-SiC/Si(100), выращенных при различных температурах методом химической конверсии из паров гексана, изучалась нами методом оптической интерференционной микроскопии (WLI) в работе [9]. Рентгенодифракционные и электронографические исследования, проведенные на этих образцах, показали поликристаллическую структуру выращенных пленок 3C-SiC с преимущественной ориентацией в направлении оси (200) [9]. Параметр шероховатости внешней поверхности S_q , оцененный с помощью метода WLI, даже для достаточно толстых (более 100 nm) пленок карбидизированного кремния, несмотря на значительное (~ 20%) несоответствие решеток исходной гетеропары, оставался, однако, довольно низким. Для большинства выращенных гетероструктур 3C-SiC/Si(100) величина S_q не превышала 3 nm при исходной шероховатости подложек Si(100) $S_q \sim 1.5$ nm. Высокое морфологическое качество поверхности сохранялось и после осаждения на подстилающий карбидизированный слой кремния эпитаксиальной пленки 3C-SiC с использованием смеси газов [9].

Проведенные исследования морфологии внешней поверхности образцов позволяют предположить, что и внутренняя граница пленки 3C-SiC, формирующая гетеропереход между слоем карбида кремния и эпитаксиальным кремнием, также будет достаточно гладкой и резкой. Данный вывод, в частности, подтверждается многочисленными результатами исследований, выполненных методом просвечивающей электронной микро-

скопии различными авторами [7,12–14]. В отличие от релаксированного гетероперехода SiGe/Si, характеризующегося появлением в его окрестности нарушенной области пластической деформации, т.е. трехмерной сетки дислокаций несоответствия, распространяющейся в оба слоя [15,16], плотность дислокаций несоответствия на гетерогранице 3C-SiC/Si остается достаточно низкой вследствие различного характера деформации прилегающего к гетерогранице слоя кремния. При гетероэпитаксии слой SiGe растягивает, а слой 3C-SiC сжимает в плоскости структуры решетку кремния в окрестности соответствующего гетероперехода. Возможная преимущественная локализация протяженных дефектов исключительно вдоль границ зерен нанокристаллической пленки по причине высокой поверхностной энергии, накапливаемой в поликристаллическом слое, широко дискутируется в настоящее время в литературе, в частности при обсуждении характеристик межфазных границ в металлических образцах [7,17].

3. Инфракрасная спектроскопия гетероперехода между слоями карбида кремния и кремния

Наиболее прямым способом обнаружения нарушенного дефектного слоя со стороны кремния в окрестности гетероперехода является использование метода инфракрасной фотолуминесценции. Наиболее часто данный метод используется для выявления области пластической деформации в упругонапряженных частично релаксированных гетероструктурах на основе кремния и германия [18]. Характерный вид спектральных зависимостей, наблюдаемый в ближней области инфракрасного диапазона для ряда структур 3C-SiC/Si(100), выращен-

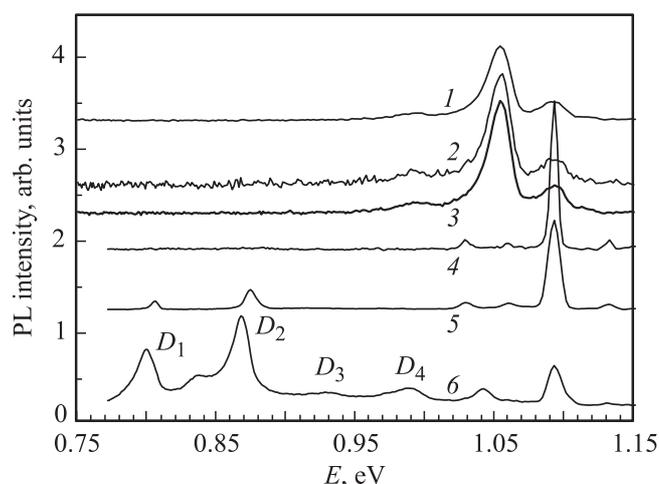


Рис. 1. Спектры фотолуминесценции структур 3C-SiC/Si(100) (образцы: 1 — № 903, 2 — № 804, 3 — № 707) и структур $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}(100)$ (образцы: 4 — № 316, 5 — № 315, 6 — № 308) с разной степенью релаксации упругой деформации в слоях SiGe, полученные при 6 К.

ных в различных режимах, представлен на рис. 1 кривыми 1–3. Зависимости получены при 6 К с использованием для возбуждения электронно-дырочной подсистемы в кремнии арсенид-галлиевого лазера. На этом же рисунке для сравнения (кривые 4–6) показаны спектры инфракрасной фотолюминесценции нескольких гетероструктур $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}(100)$ с разной степенью упругой релаксации, определяемой составом и толщиной слоя твердого раствора. Степень релаксации упругих напряжений в $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ -структурах менялась от минимальной для образца SiGe/Si , соответствующего кривой 4, до максимальной для аналогичного образца, соответствующего кривой 6. Это проявлялось в возникновении в области энергий 0.8–1.0 eV серии линий (D1–D4), связанных с формируемой в окрестности гетерограницы сетки дислокаций несоответствия.

Кривые 1–3, представленные на рис. 1, прежде всего демонстрируют отсутствие дислокаций в слое кремния, прилежащего к гетерогранице 3C-SiC/Si(100). Релаксация накапливаемых в системе упругих напряжений практически полностью проходит по границам зерен внутри нанокристаллического карбидного слоя. Влияние на кремний формируемого карбидного слоя, однако, проявляется в хорошо выраженном изменении спектра краевой фотолюминесценции кремния. Для всех исследованных структур нами наблюдалось резкое уменьшение интенсивности экситонной линии, связанной с переходами зона–зона (1.094 eV). В то же время интенсивность линии с энергией 1.055 eV, связанной с экситонными переходами через промежуточное состояние локальных дефектов, резко нарастала. В нашем случае такими дефектами, вероятнее всего, являются дефекты вакансионного типа, появление которых, как показано далее, возможно, связано с реиспарением кремния в процессе роста слоя SiC. Возможно, именно скопление этого типа дефектов на границе слоя кремния и является причиной зарождения пустот в окрестности гетерограницы, довольно часто наблюдаемых на снимках, полученных методом просвечивающей электронной микроскопии [7,14].

4. Механизмы и особенности карбидизации поверхности кремниевой пластины

Основываясь на приведенных результатах, обсудим возможные механизмы и особенности роста пленки 3C-SiC на стадии процесса карбидизации поверхностного слоя кремния в потоке паров углеводорода. Адсорбируемые поверхностью роста молекулы углеводорода (поток F_1), распадаясь, формируют диффузионный поток атомов углерода F_2 , распространяющийся от внешней поверхности вглубь растущего слоя 3C-SiC (рис. 2). Атомы углерода, достигая внутренней границы, реагируют с атомами кремния, замещая в кристаллической решетке верхнего монослоя подложечного кремния часть атомов.

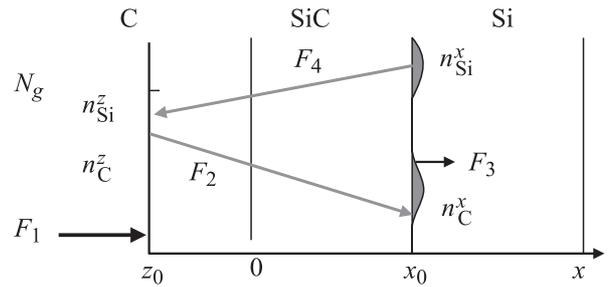


Рис. 2. Схема распределения диффузионных потоков F_i в пленке в процессе роста и значения поверхностных концентраций атомов углерода (кремния) на внутренней n_C^x (n_{Si}^x) и внешней n_C^z (n_{Si}^z) границах пленки.

Механизм карбидизации кремния по своей природе близок к механизму термического окисления поверхности кремния в парах воды [19], так как оба способа модификации характеристик поверхности кремния определяются диффузионными процессами. При образовании на поверхности кремния сплошного монослоя карбида кремния из-за несоответствия объемов кристаллических решеток Si и 3C-SiC происходит замещение атомами углерода половины атомов Si из решетки монокристаллического кремния. Около 10% атомов кремния, вытесненных из решетки кремния углеродом в процессе карбонизации поверхности, расходуется на достраивание пустот на гетерогранице, образовавшихся ввиду несоответствия постоянных решеток Si и 3C-SiC. Остальные высвободившиеся в результате взаимодействия с углеродом атомы кремния (примерно 40% от общего числа атомов в решетке Si-матрицы) формируют встречный поток F_2 диффузионный поток атомов кремния F_4 в растущем слое 3C-SiC, что отличает процесс карбидизации от процесса термического окисления кремния. Введение в модель встречного диффузионного потока атомов кремния, приводящего к росту пленки SiC в обе стороны, вполне оправдано, так как позволяет понять наблюдаемый в ряде случаев рост островков на поверхности карбидного слоя, получаемого методом химической конверсии [8,20], т.е. с использованием в процессе роста пленки только одного потока молекул углеводорода.

В соответствии с общими представлениями газовой теории поток молекул газа к поверхности равен $F_1 = 3.5 \cdot 10^{22} p_g / (m_g T_g)^{0.5}$, где m_g — масса молекулы газа, а давление газа в реакторе p_g через коэффициент Генри H связано с максимальной концентрацией молекул в газе N_g соотношением $N_g = H p_g$. Далее будем использовать общепринятые обозначения, введенные в работе [19]. В соответствии с этим поток F_1 запишем в виде $F_1 = h(N_g - n_C)$, где h — коэффициент массопереноса, отражающий специфику адсорбционной способности поверхности и особенности распада адсорбируемых молекул в процессе их пиролиза. Поверхностная концентрация углерода $n_C = n_C^z + n_{\text{Si}}^z$ от-

ражает суммарное количество атомов углерода, диффундирующих в глубь слоя 3C-SiC (n_C^z), и атомов углерода (n_{Si}^z), вступающих в реакцию карбидообразования с атомами кремния, продиффундировавшими от гетерограницы 3C-SiC/Si к внешней поверхности структуры. В статическом режиме поток углерода через карбидный слой определяется градиентом концентрации углерода: $F_2 = -D_C(dn_C/dx) = D_C(n_C^z - n_C^x)/d_{SiC}$; поток кремния F_4 — градиентом концентрации атомов кремния: $F_4 = -D_{Si}(dn_{Si}/dx) = D_{Si}(n_{Si}^x - n_{Si}^z)/d_{SiC}$. Здесь $d_{SiC} = |x_0| + |z_0|$ — толщина карбидной пленки, $D_{C(Si)}$ — коэффициенты диффузии атомов углерода (кремния) в слое 3C-SiC при заданной температуре роста, n_C^x — концентрация углерода, поступающего к гетерогранице 3C-SiC/Si, x_0 — толщина слоя карбида кремния, наращиваемого со стороны внутренней границы пленки, $n_{Si}^x = (2/3)n_C^x$ — концентрация атомов кремния, высвобождающихся из решетки кремния в процессе карбидизации и диффундирующих к внешней границе z_0 слоя 3C-SiC/Si.

Предполагая далее резкими профиль поверхности и формируемой гетерограницы, можно связать потоки $F_{3,4}$ со скоростью k протекания химической реакции карбидизации на границах раздела сред соотношениями $F_3 = kn_C^x$, $F_4 = kn_{Si}^z$. В статическом режиме соотношение между потоками определяется равенствами $F_1 = F_2 + F_4$; $F_2 = F_3$, что позволяет выразить величины $n_C^z(n_{Si}^z)$ и $n_C^x(n_{Si}^x)$ через N_g :

$$n_{Si}^x = (2/3)n_C^x, \quad n_{Si}^z = A_2n_C^x, \quad n_C^z = A_1n_C^x, \quad n_C^x = N_g\Phi(d_{SiC}), \quad (1)$$

где

$$\Phi(d_{SiC}) = 1/\{1 + k/h + kd_{SiC}/D_C + (2D_{Si}/3hd_{SiC}) \times (1/3 + hd_{SiC} - D_{Si})/(D_{Si} + kd_{SiC})\},$$

$$A_1 = (D_C + kd_{SiC})/D_C, \quad A_2 = (2/3)D_{Si}/(D_{Si} + kd_{SiC}).$$

Используя полученные соотношения, нетрудно найти и соответствующие выражения для потоков. Приравняв скорость роста слоя и скорость протекания химической реакции карбидизации на соответствующей границе, получим следующие соотношения: $F_3 = n_0(dx_0/dt) = kn_C^x$, $F_4 = n_0(dz_0/dt) = kn_{Si}^z = kA_2n_C^x$, где n_0 — количество молекул углерода в единичном объеме слоя 3C-SiC. Полная скорость роста карбидного слоя соответственно равна $n_0(dx_0 + dz_0) = n_0d(u) = k(1 + A_2)n_C^x dt$. Искомая зависимость $d_{SiC}(t)$ определяется решением интегрального уравнения

$$n_0 \int_{\delta_{SiC}}^{d_{SiC}} (\Phi^{-1}(u)/(1 + A_2(u))) du = kN_g \int_{\tau}^{t_{gr}} dt. \quad (2)$$

Нижние пределы интегрирования введены по причине неправомерности использования диффузионной модели в начальный момент роста пленки, т.е. в момент

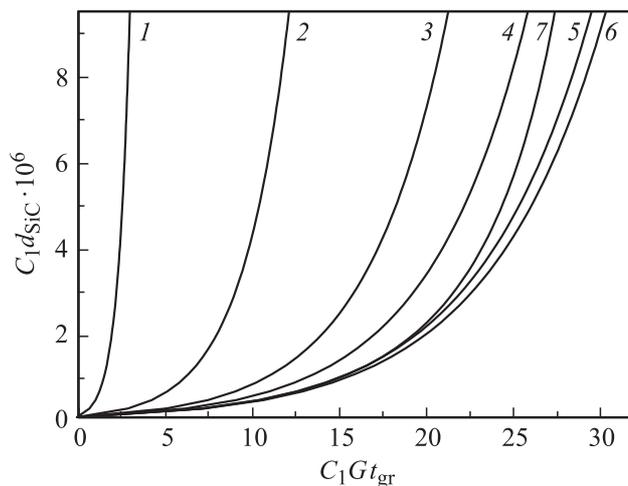


Рис. 3. Общий вид зависимости безразмерной толщины карбидной пленки C_1d_{SiC} от безразмерного времени роста SiC-слоя C_1Gt_{gr} , рассчитанный по формуле (4) для $k = 0.01$, $h = 0.02$, $D_C = 0.1$ и различных значений параметра $D_{Si} = 0.3$ (1), 0.2 (2), 0.1 (3), 0.05 (4), 0.01 (5), 0.001 (6), 0.0001 (7).

$t_{gr} = 0$. Поэтому в модели начало роста предполагается с некоторого времени $t_{gr} = \tau$, отвечающего появлению на поверхности пленки тонкого ($\delta_{SiC} \sim 1$ nm) слоя 3C-SiC. Вводя обозначения: $C_0 = 1 + k/h$, $C_1 = k/D_C$, $C_2 = 2D_{Si}/3k$, $C_3 = 1/3h - D_{Si}/h$, $C_4 = D_{Si}/k$, $A_2 = C_2/(C_4 + d_{SiC})$, запишем интегральное уравнение (2) в более удобной форме:

$$\int_{\delta_{SiC}}^{d_{SiC}} [(C_2 + C_2C_3/u) + (C_0 + C_1u) \times (C_4 + u)] / (C_2 + C_4 + u) du = k(t_{gr} - \tau)N_g/n_0. \quad (3)$$

Интегрируя с учетом того, что $\delta_{SiC} \ll d_{SiC}$, получим функциональную зависимость, связывающую толщину растущего слоя со временем роста, следующего вида:

$$k(t_{gr} - \tau)N_g/n_0 = G(d_{SiC})(t_{gr} - \tau) = C_1d_{SiC}^2/2 + (C_0 - C_1C_2)d_{SiC} + C_2(1 - C_0 + 5C_1C_2/2 - 2C_3/5C_2) \times \ln(1 + 2d_{SiC}/5C_2) + (2C_3/5) \ln(d_{SiC}/\delta_{SiC}). \quad (4)$$

Зная коэффициенты диффузии атомов углерода и кремния в карбидной пленке, при необходимости нетрудно рассчитать зависимость толщины пленки 3C-SiC от времени роста $d_{SiC}(t_{gr})$. Данная формула устанавливает взаимосвязь толщины растущей пленки со временем роста, когда рост происходит как с внутренней, так и внешней стороны слоя, обусловливая смещение границ слоя в обе стороны. Общий вид зависимости $d_{SiC}(t_{gr})$, рассчитанный по формуле (4) для различных значений параметра $D_{Si} = 0.0001-0.3$, показан в безразмерной форме на рис. 3.

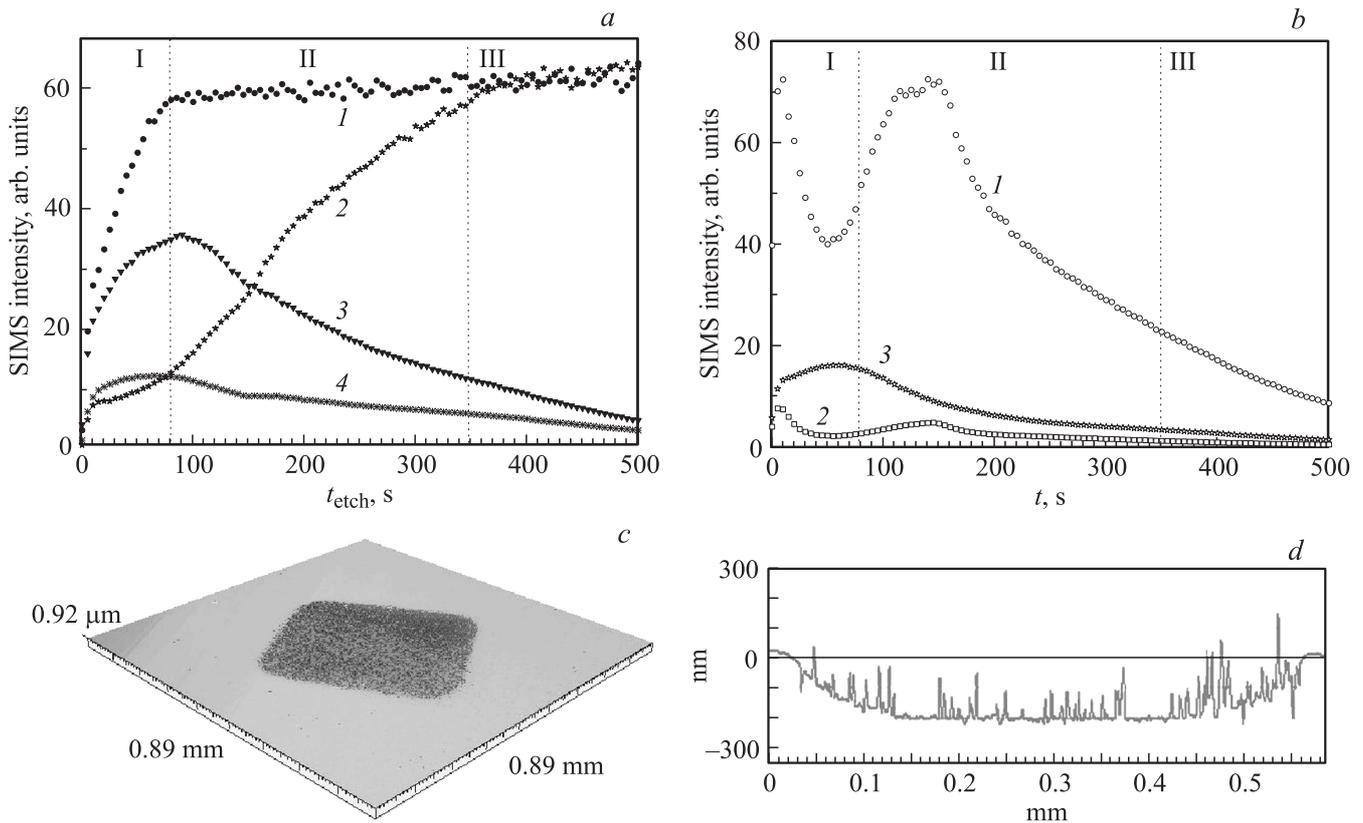


Рис. 4. Распределение компонент основного (а): 1 — ^{28}Si , 2 — $^{28}\text{Si}_2$, 3 — ^{12}C , 4 — SiC и примесного (b) составов: 1 — ^{16}O , 2 — SiO_2 , 3 — CN, по данным вторичной ионной масс-спектрометрии (область I соответствует слою SiC, область III — слою Si, область II — ширине формируемого гетероперехода, время травления $t_{\text{etch}} = 100$ s соответствует глубине ямки травления приблизительно равного 40 nm); внешний вид (c) и профиль (d) поверхности ямки травления для образца 3C-SiC/Si(100) № 807.

Наиболее простой вид зависимость $d_{\text{SiC}}(t_{\text{gr}})$ приобретает в том случае, если диффузия атомов кремния в слое 3C-SiC чрезвычайно мала ($D_{\text{Si}} \rightarrow 0$) по сравнению с диффузией в нем атомов углерода (например, хотя бы вследствие низкой растворимости кремния в слое карбида кремния). Тогда коэффициенты C_2 , C_4 и A_2 можно положить равными нулю, вследствие чего внешняя граница слоя будет оставаться неподвижной. В этом случае d_{SiC} и t_{gr} связаны простым уравнением $2G(t_{\text{gr}} - \tau)/C_1 = (2C_0/C_1)d_{\text{SiC}} + d_{\text{SiC}}^2$. Решая последнее, получим хорошо известное из теории термического окисления кремния [19] соотношение

$$d_{\text{SiC}} = (C_0/C_1) \{ [1 + 2GC_1(t_{\text{gr}} - \tau)/C_0^2]^{0.5} - 1 \}, \quad (5)$$

связывающее толщину пленки с временем ее роста. Сопоставление формул (4) и (5) показывает, что характер зависимости (4) в общем случае отличается от закона $d_{\text{SiC}}^2 \sim t_{\text{gr}}$ термического окисления кремния, наиболее часто используемого на практике. Толщина карбидизируемого слоя явным образом зависит от скорости диффузии атомов кремния в нем, обуславливая рост пленки как со стороны ее внутренней границы, так и со стороны внешней поверхности. Именно этим фактором, т.е. высокой скоростью роста пленки за счет

диффузионного потока кремния от гетерограницы SiC/Si к внешней поверхности, можно объяснить появление в ряде случаев сильно развитой (островкового типа) поверхности карбидной пленки 3C-SiC(111) [11,20], а также возможность формирования пустот в окрестности гетероперехода под слоем карбида кремния [7,14].

Зная толщину и время роста слоя 3C-SiC, можно оценить, на основании полученных формул, значения коэффициентов диффузии атомов углерода (кремния) в слое карбида кремния. Оценка толщин карбидизированных слоев кремния, полученных нами при пониженных ростовых температурах, была проведена путем комбинации метода WLI и метода вторичной ионной масс-спектрометрии (SIMS). Характер распределения по глубине структуры компонент ее основного (Si, C, SiC) и примесного (O, N) состава для одного из исследованных образцов (№ 807) представлен на рис. 4, a, b. Распределение компонент состава по толщине структуры, полученное из анализа данных вторичной ионной масс-спектрометрии, позволяет оценить резкость формируемого между пленкой карбида кремния и подложкой Si(100) гетероперехода и соответственно толщину выращенного карбидного слоя. Толщина карбидной пленки чаще всего определялась по факту выхода концентрации кремния на

максимальное значение. Оценить по профилю распределения углеродной компоненты резкость гетероперехода в большинстве случаев довольно затруднительно вследствие, как показано далее, значительного неоднородного растравливания ионным пучком поверхности рассматриваемой структуры.

Другой способ оценки толщины выращенного слоя карбида кремния был основан на анализе характера распределения по глубине слоя атомов элементов, плохо растворяющихся в карбидной пленке и вытесняемых в процессе карбидизации из растущего слоя в область гетерограницы. Примером такого характерного распределения является распределение концентрации кислорода (рис. 4, b), поступающего в растущий слой из атмосферы остаточных газов в реакторе установки. Из рис. 4, b следует, что максимум накопления концентрации кислорода в гетероструктуре приходится на область гетероперехода (II) между выращиваемым слоем карбида кремния и подложечным кремнием. Толщина последнего в зависимости от условий роста пленки могла меняться в интервале от сотни нанометров до нескольких десятков нанометров, при этом основным фактором, определяющим толщину карбидной пленки, являлась температура, а не длительность процесса карбидизации поверхности кремниевой пластины.

Зная характер распределения элементного состава по глубине и скорость травления приповерхностного слоя структуры, нетрудно оценить толщину выращенной карбидной пленки (область I на рис. 4). Скорость травления определяется по глубине ямки травления, полученной в процессе SIMS-анализа. Характерный вид последней, отражающий помимо прочего и проблемы, связанные с проведением травления карбидного слоя ионным пучком, получен с использованием метода оптической интерференционной микроскопии и показан для образца № 807 на рис. 4, c, d. Опыт показывает, что относительно гладкая поверхность внутри ямки травления получается только для образцов с достаточно тонкими приповерхностными слоями карбида кремния. Травление достаточно толстых ($> 0.1 \mu\text{m}$) слоев карбида кремния чаще всего было затруднено из-за сильного растравливания поверхности карбидного слоя ионным пучком, как это, в частности, следует из рис. 4, c, d. Сильная шероховатость дна ямки травления (рис. 4, d) в этом случае приводит к погрешности оценки истинной толщины слоя SiC по характеру наблюдаемого распределения углеродной компоненты. Поэтому толщина слоя 3C-SiC определялась нами из анализа распределения по глубине структуры только атомов кремния ^{28}Si либо атомов кислорода.

Определив глубину ямки травления d_{etch} (рис. 4) и зная полное время травления образца t_{etch} (предполагается, что скорости травления v_{etch} ионным пучком карбидного слоя и подложечного кремния приблизительно одинаковы), можно оценить толщину выращенной карбидной пленки $d_{\text{SiC}} = v_{\text{etch}}(\text{SiC})t_{\text{etch}}^*(\text{SiC})$,

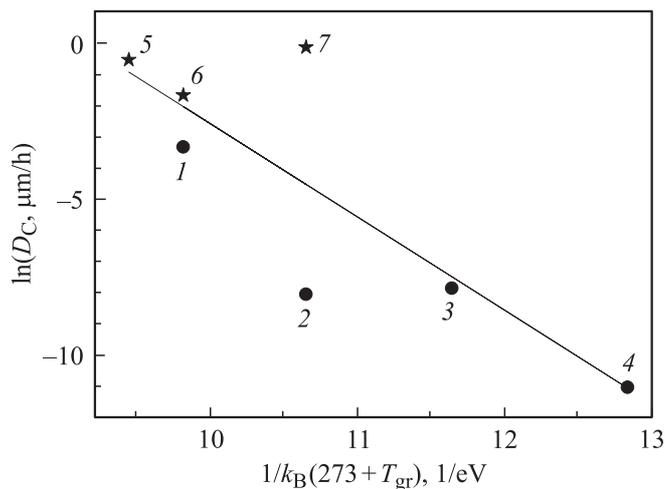


Рис. 5. Зависимость коэффициента диффузии атомов углерода D_C в пленке карбида кремния от температуры роста T_{gr} : 1–4 — данные получены на основе результатов наших экспериментов для образцов № 807, 706, 808, 803 соответственно; 5–7 — на основе данных, взятых из литературных источников: [12], [14], [13] соответственно; сплошная линия — усредненная характеристика, полученная по методу наименьших квадратов.

где $v_{\text{etch}}(\text{SiC}) \approx d_{\text{etch}}/t_{\text{etch}}$. Для более точного определения d_{SiC} и $v_{\text{etch}}(\text{SiC})$ необходим точный контроль времени травления слоя SiC с остановкой процесса травления на гетеропереходе в начале роста измеряемой масс-спектрометром кремниевой компоненты, т. е. в момент времени $t_{\text{etch}} = t_{\text{etch}}^*(\text{SiC})$. Зная толщину и время роста слоя 3C-SiC, нетрудно оценить на основании полученных формул значения коэффициентов диффузии атомов углерода (кремния) в слое карбида кремния. Для простоты оценки будем предполагать, что диффузия атомов кремния в карбидном слое незначительна, вследствие чего справедлива формула (5), и толщина выращенной пленки связана с временем карбонизации простым соотношением $(d_{\text{SiC}})^2 \sim (2N_g D_C/n_0)t_{gr}$. На основании этого соотношения нетрудно провести оценку коэффициента диффузии атомов углерода $D_C = D_C^0 \exp\{-E_C^a/k_B(273 + T_{gr})\}$ в слое 3C-SiC. Вычисленные значения коэффициентов диффузии D_C для температурных условий, соответствующих росту пленок в наших экспериментах (образцы № 706, 803, 807, 808), представлены на рис. 5 точками 1–4. Карбидизация поверхности кремниевой пластины проводилась в образце № 706 при температуре $T = 900^\circ\text{C}$ в течение 60 min, в образце № 803 — при $T = 700^\circ\text{C}$ в течение 150 min, в образце № 807 — при $T = 1000^\circ\text{C}$ в течение 35 min, в образце № 808 — при $T = 800^\circ\text{C}$ в течение 200 min. Здесь же точками 5–7 показаны значения D_C , оцененные по данным, взятым из литературных источников [12–14], для пленок, выращенных при более высоких температурах. На этом же рисунке сплошной линией показана усредненная по методу наименьших квадратов зависимость $\ln D_C = 24 - 2.7k_B T_{gr}$, отражающая оценоч-

ное значение энергии активации диффузионного процесса $E_C^a \approx 2.7 \text{ eV}$.

5. Заключение

Рассмотрены механизмы и особенности роста слоев карбида кремния в методе вакуумной химической эпитаксии в интервале ростовых температур от 1000 до 700°C. На основании проведенных исследований спектров фотолюминесценции в ближнем инфракрасном диапазоне длин волн и данных масс-спектрометрического анализа изучена структура формируемого гетероперехода. Обнаружено значительное возрастание концентрации точечных дефектов и отсутствие выраженной дислокационной структуры в слое кремния, прилегающего к гетеропереходу 3C-SiC. По данным морфологических исследований поверхности растущей пленки по аналогии с теорией термического окисления кремния построена теория карбидизации поверхностных слоев кремния. Отличительной особенностью рассмотренной модели является включение в нее встречных, от подложки к поверхности структуры, диффузионных потоков атомов кремния. Проведены оценки скорости роста пленок и энергии активации диффузионных процессов. Проведенные эксперименты в совокупности с разработанной моделью роста объясняют наблюдаемые на практике образования пустот под формируемым карбидным слоем в матрице кремния и возможность формирования развитой морфологии поверхности (островковый рост пленки) даже в условиях использования в реакторе только одного потока углеводорода.

Авторы выражают глубокую признательность О.А. Подьячевой за помощь, оказанную при построении ростовой модели, М.Л. Орлову и Н.А. Алябиной при проведении ростовых экспериментов, М.Н. Дроздову за снятие SIMS-спектров, а также В.И. Вдовину, О.Ф. Вывенко и другим участникам семинара в центре „Нанотехнологии“ СПбГУ (Санкт-Петербург) за проявленное внимание к работе и высказанные замечания.

Список литературы

- [1] K.H. Wu, Y.K. Fang, J.J. Ho, W.T. Hsieh, T.J. Chen. *Electron. Device Lett. IEEE*, **19**, 294 (1998).
- [2] W.T. Hsieh, Y.K. Fang, W.J. Lee, C.W. Ho, K.H. Wu, J.J. Ho, J.D. Hwang. *Electron. Lett.* **36**, 86 (2000).
- [3] M.J. Kumar, C.L. Reddy. *Microelectr. Reliability*, **43**, 1145 (2003).
- [4] T. Sugii, T. Ito, Y. Furumura, M. Doki, F. Mieno, M. Maeda. *Electron. Device Lett. IEEE* **9**, 87 (1988).
- [5] K.J. Roe, G. Katulka, J. Kolodzey, S.E. Saddow, D. Jacobson. *Appl. Phys. Lett.* **78**, 2073 (2001).
- [6] А.А. Лебедев, А.М. Стрельчук, Д.В. Шамшур, Г.А. Оганесян, С.П. Лебедев, М.Г. Мымбаева, А.В. Садохин. *ФТП* **44**, 1436 (2010).
- [7] F.M. Morales, S.I. Molina, D. Araujo, R. Carcia, V. Cimalla, J. Pezoldt. *Diamond Related Mater.* **12**, 1227 (2003).
- [8] Л.К. Орлов, Ю.Н. Дроздов, В.И. Вдовин, Ю.И. Тарасова, Т.Н. Смылова. *ФТТ*, **51**, 1018 (2009).
- [9] Л.К. Орлов, Ю.Н. Дроздов, М.Н. Дроздов, О.А. Подьячева, В.И. Вдовин. *ЖСХ*, **51**, S148 (2010).
- [10] Л.К. Орлов, Э.А. Штейнман, Н.Л. Ивина, В.И. Вдовин. *ФТТ* **53**, 1706 (2011).
- [11] Yu. Narita, T. Inubushi, M. Harashima, K. Yasui, T. Akahane. *Appl. Surf. Sci.* **216**, 575 (2003).
- [12] Ch. Zgheib, L.E. Mc Neil, P. Masri, Ch. Firster, F.M. Morales, Th. Stauden, O. Ambacher, J. Pezoldt. *Appl. Phys. Lett.* **88**, 211909 (2006).
- [13] H. Nakazawa, M. Suemitsu. *Appl. Phys. Lett.* **79**, 755 (2001).
- [14] H. Nakazawa, K. Yagi. *Phys. Stat. Sol.* **202**, 335 (1997).
- [15] T.G. Yugova, V.I. Vdovin, M.G. Milvidskii, L.K. Orlov, V.A. Tolomasov, A.V. Potapov, N.V. Abrosimov. *Thin Solid Films* **336**, 112 (1999).
- [16] В.И. Вдовин, О.А. Кузнецов, М.Г. Мильвидский, Л.К. Орлов, Т.Г. Югова. *Кристаллография* **38**, 269 (1993).
- [17] Н.А. Конева, Н.А. Попова, Э.В. Козлов. Тр. 13 Междунар. Симп. „Упорядочение в минералах и сплавах“, Ростов н/Д (2010). Т. 2. С. 20.
- [18] Л.К. Орлов, Н.Л. Ивина, Е.А. Steinman, V.I. Vdovin. *Solid State Phenomena*, **69–70**, 377 (1999).
- [19] В.Е. Deal, A.S. Grove. *J. Appl. Phys.* **36**, 3770 (1965).
- [20] Л.К. Орлов, Ю.Н. Дроздов, М.Н. Дроздов, Ю.И. Тарасова, Т.Н. Смылова, Н.А. Алябина, Е.А. Питиримова, В.И. Вдовин. *Изв. РАН. Сер. физ.* **73**, 1034 (2009).