

06;12

О параметрах установки, определяющих скорость роста эпитаксиальных слоев карбида кремния в вакууме

© С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, Н.С. Савкина, А.А. Волкова

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: Sergei.Davydov@mail.ioffe.ru

(Поступило в Редакцию 29 апреля 2004 г.)

Обобщение модели, развитой в [5], позволило рассмотреть влияние геометрии ростовой ячейки, градиентов температуры и давления на скорость роста эпитаксиальных слоев SiC в вакууме. Обсуждаются полученные экспериментальные данные по зависимости температуры подложки от тока в индукционной катушке для различных положений ячейки относительно индуктора.

Введение

В настоящее время для описания процессов роста эпитаксиальных полупроводниковых пленок из газовой фазы разработан целый ряд расчетных схем. Все они, однако, относятся к процессам переноса атомов и молекул, образующих пленку, сквозь инертный газ, заполняющий рабочее пространство реактора [1–3], и только последний раздел обзора [4] посвящен описанию роста пленок в разреженной атмосфере (вакууме). Такая диспропорция публикаций обусловлена вполне объективными причинами. В атмосфере инертного газа длина свободного пробега частиц λ много меньше характерных геометрических размеров ростовой ячейки r и l (где r — внутренний радиус ячейки, l — расстояние между источником паров и подложкой), что позволяет использовать для описания процессов переноса уравнения гидродинамики. В сильно разреженной атмосфере, наоборот, $\lambda \gg r, l$ и имеют место стохастические процессы, описываемые, как правило, по методу Монте-Карло.

В работе [5] нами была предложена простая модель эпитаксиального роста слоев SiC, основанная на уравнении Гертца–Кнудсена, согласно которому молярный поток карбида кремния J определяется выражением

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

где M — молярная масса SiC, R — универсальная газовая постоянная, T — температура, $p = B \exp(-Q/RT)$ — равновесное давление пара SiC (Q — теплота сублимации SiC, B — коэффициент).

Мы учитывали также эмпирически введенный коэффициент прилипания молекул карбида кремния к подложке $\alpha = A \exp(-E_a/RT)$, где E_a — потенциальный барьер, который должна преодолеть молекула, чтобы „осесть“ на подложке; A — коэффициент. Тогда скорость роста G имеет вид

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

где ρ — плотность растущей пленки SiC.

С экспериментом сопоставлялась приведенная скорость роста $g \equiv G/G_0$, где скорость G отвечает температуре T , а G_0 — максимальной (в данном опыте) температуре T_0 . В рамках такой модели удалось

вполне удовлетворительно описать экспериментальные данные [5].

Как следует из формул (1) и (2), в [5] не учитывалось влияние на поток частиц, их прилипания к стенкам ячейки и градиента температуры. В настоящей работе в рамках нашей модели мы рассмотрим, как учет этих факторов влияет на скорость роста.

Описание экспериментальной установки

Подробное описание установки сублимационного роста эпитаксиальных слоев в вакууме приведено в работе [6]. Напомним, что в установке используется индукционный нагрев ростовой ячейки (в данном случае графитовой), в которой расположены источник паров SiC (синтезированный порошок) и подложка монокристаллического SiC, на поверхности которой происходит рост эпитаксиального слоя. На рис. 1 дана схема ростовой ячейки и ее расположение внутри цилиндрического ин-

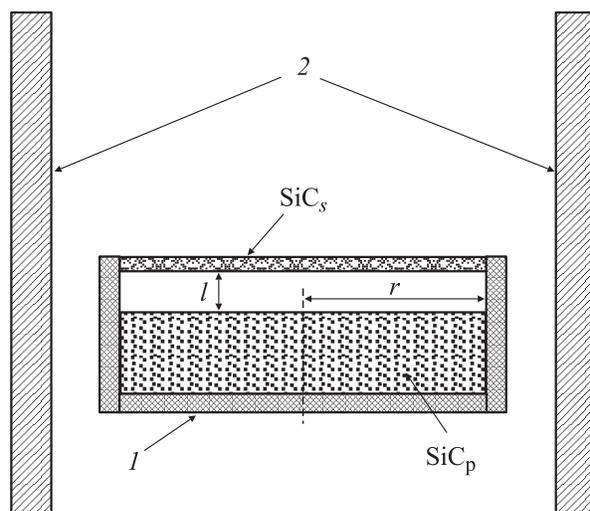


Рис. 1. Схема ячейки роста эпитаксиальных слоев SiC в вакууме. 1 — ростовая ячейка, 2 — индуктор, SiC_p — пудра карбида кремния, SiC_s — подложка.

дуктора, присоединенного к высокочастотному генератору. Специальное механическое устройство перемещает ячейку внутри индуктора. Управление током индуктора и, следовательно, температурой подложки осуществляется с помощью подачи высокого напряжения на анод генераторной лампы. На практике основным, задающим управление параметром является анодный ток генераторной лампы (I_a).

Влияние геометрии реакционного пространства

Предположим, что реакционное пространство ростовой ячейки представляет собой цилиндр (рис. 1) с внутренним радиусом r и длиной l . Молекулы движутся хаотически, рассеиваясь в основном на стенках ячейки (см., например, рис. 24 в [4]). Пусть коэффициент прилипания молекулы к стенке есть $\bar{\alpha} = \bar{A} \exp(-\bar{E}_a/RT)$, где \bar{E}_a — энергетический барьер, который должна преодолеть молекула SiC, чтобы прилипнуть к графитовой стенке. Тогда убыль потока частиц из-за рассеяния на стенках есть $dJ = -(J/r)dz$, где ось z совпадает с осью цилиндра. На стенку уходит $\bar{J}(l) = J(0)[1 - \exp(-l/r)]$, где $J(0)$ — поток, выходящий из источника и описываемый выражением (1). В единицу времени к единице площади стенки прилипает $\bar{\alpha}\bar{J}$ частиц, а $(1 - \bar{\alpha})\bar{J}$ частиц возвращается в основной поток. До подложки доходит поток $J(0)[1 - \bar{\alpha}(1 - \exp(-l/r))]$. При этом на подложке осаждается (в единицу времени на единице площади) количество частиц, равное

$$\begin{aligned} \bar{J} &= J(0)F(l/r), \quad F(l/r) = \alpha f(l/r), \\ f(l/r) &= 1 - \bar{\alpha}[1 - \exp(-l/r)]. \end{aligned} \quad (3)$$

Таким образом, для скорости роста теперь имеем

$$\tilde{G} = Gf(l/r), \quad (4)$$

где G дается формулой (2).

При $\bar{\alpha} = 0$ и $l = 0$ имеем $\tilde{G} = G$. При $l = \infty$ имеем $\tilde{G} = G(1 - \bar{\alpha})$, т.е. скорость роста понижается за счет прилипания молекул SiC к стенкам. В случае $\bar{\alpha} = 1$ получаем $\tilde{G} = G \exp(-l/r)$, и при $(l/r) \gg 1$ рост практически прекращается, так как все молекулы SiC прилипают к стенкам.

Легко показать, что при $(l/r) \ll 1$ функция $F \approx \alpha[1 - \bar{\alpha}(l/r)]$, т.е. прилипающие молекулы SiC к стенкам исчезающе мало ослабляют поток. Теперь рассмотрим предел $(l/r) \gg 1$, положив для простоты $\bar{\alpha} = \alpha$ и предполагая тем самым, что вероятность прилипания молекул к графитовым стенкам реактора такая же, как и к подложке. Варьируя коэффициент прилипания α , легко показать, что при $\alpha^* \approx 0.25$ функция F имеет максимум $F_{\max} \approx 0.25$. В случае $l \approx r$ функция $F \approx \alpha[1 - \bar{\alpha}(1 - e^{-1})]$. Если опять положить $\bar{\alpha} = \alpha$, то при $\alpha^* \approx 0.79$ имеем $F_{\max} \approx 0.395$.

Таким образом, в ростовой ячейке выгодно располагать подложку на расстоянии $l \leq r$ от источника молекул карбида кремния. Именно такая геометрия реализована в нашей установке: $l = 7 \text{ mm}$, $r = 18 \text{ mm}$. Приведенное описание, разумеется, крайне упрощено (не учитываются, например, процессы многократного рассеяния частиц на стенке, рассеяние на подложке с последующим переходом молекул на стенку и т.д.), но позволяет, как мы надеемся, правильно понять влияние геометрии реакционного пространства на скорость роста эпитаксиальных слоев. Отметим, что учет ухода молекул SiC на стенку приводит к простейшей перенормировке скорости роста, сводящейся к появлению дополнительного множителя $f(l/r)$ (см. (4)). При подгонке величины \tilde{G} к данным эксперимента по схеме работы [5] учет $f(l/r)$ скажется в основном на величине безразмерного множителя A . Усложняется, естественно, и температурная зависимость, переходя от $G \propto T^{-1/2} \exp(-\omega)$, где $\omega \equiv (Q + E_a)/RT_0$, к

$$\tilde{G} \propto G \cdot \{1 - \bar{A} \exp(-\bar{\omega}_a)[1 - \exp(-l/r)]\},$$

где $\bar{\omega} \equiv \bar{E}_a/RT_0$.

При этом для определения дополнительных параметров модели \bar{E}_a и \bar{A} требуются дополнительные экспериментальные точки или какое-либо упрощающее предположение типа $\bar{\alpha} = \alpha$.

Влияние градиентов температуры и давления

Перейдем теперь к исследованию влияния как градиента давления паров SiC, так и температурного перепада $\Delta TR = T(0) - T(l)$ в ячейке на скорость роста ($T(0)$ — температура источника; $T(l)$ — температура подложки; l , как и выше, — расстояние между источником и заправкой). Для этого воспользуемся задачей [7] о протекании газа по трубе длиной l и радиусом r . В отличие от [7], где рассматривался случай $(l/r) \gg 1$, будем считать отношение (l/r) произвольным (по-прежнему предполагается, что $\lambda \gg r, l$). Тогда можно показать, что приближенное выражение для потока будет иметь вид

$$\begin{aligned} J &= (16/3) \frac{I}{\sqrt{2\pi MR}} \Omega, \quad \Omega \equiv \left(\frac{p(l)}{\sqrt{T(l)}} - \frac{p(0)}{\sqrt{T(0)}} \right), \\ I &\approx (r/l) \left[\arctg \frac{l}{2r} + \frac{l}{2r} \left(\frac{l}{2r} \arctg \frac{2r}{l} - 1 \right) \right]. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь $p(0)$ и $p(l)$ — давление паров SiC над источником и на подложке соответственно. При $(l/r) \gg 1$ выражение (5) переходит в соответствующую формулу¹ [7], а $I \approx \pi(r/2l)$. В обратном пределе $(l/r) \ll 1$ имеем $I \approx \pi(l/8r)$.

¹ Для того чтобы получить выражение для потока J , формулу из [7] для количества газа Q , переносимого через трубу, нужно поделить на величину $\pi r^2 M$.

Таблица 1. Зависимость температуры подложки T_l от анодного тока генераторной лампы I_a и положения z ростовой ячейки относительно индуктора

$z, \text{ mm}$	$I_a, \text{ A}$									
	1.00	1.25	1.50	1.75	2.00	2.25	2.50	2.75	3.00	3.25
0	900	1029	1109	1200	1294	1375	1470	1494	1594	1720
5	905	1032	1121	1208	1294	1396	1476	1501	1616	1750
10	909	1043	1127	1221	1306	1414	1482	1513	1627	1760
15	914	1064	1139	1234	1313	1402	1489	1537	1643	1765
20	914	1070	1142	1228	1319	1426	1494	1542	1643	1760
25	919	1093	1150	1228	1324	1426	1489	1548	1648	1755
30	924	1090	1153	1236	1326	1426	1494	1542	1643	1750
35	924	1093	1156	1234	1326	1426	1482	1537	1638	1735
37.5	924	1083	1156	1231	1324	1420	1470	1531	1632	1725

Если бы давление паров SiC в ячейке было постоянно, т.е. выполнялось бы условие $p(0) \approx P(l) \approx p$, то

$$\Omega \approx (1/2)(\Delta T/T(0))(p/\sqrt{T(0)}), \quad (6)$$

т.е. весь процесс был бы обусловлен лишь градиентом температуры. В общем случае, однако, из (5) следует, что рост пленки будет осуществляться при условии $\Omega > 0$, так как именно при этих условиях поток молекул SiC будет направлен от источника к подложке. Тогда получим из (5)

$$\sqrt{T(0)/T(l)} > (p(0)/p(l)). \quad (7)$$

Если положить $(p(0)/p(l)) = \alpha J(0)/\tilde{J}$ (см. (3) и (4)), то получим

$$\sqrt{T(0)/T(l)} > (f(l/r))^{-1}. \quad (8)$$

Правая часть неравенства (8) по определению (см. (4)) больше 1. Таким образом, условие $(T(0)/T(l)) > 1$ является необходимым условием роста, но отнюдь не достаточным. Действительно, условие $(T(0)/T(l)) > 1$ может выполняться, а неравенство (8) будет иметь обратный знак. В этом случае величина Ω отрицательна и перенос газа идет от подложки к источнику, т.е. имеет место травление.

Неравенство (8) можно переписать в виде

$$\frac{\Delta T}{T(l)} > \tau \equiv 2\bar{\alpha} \frac{1 - \exp(-l/r)}{f(l/r)}. \quad (9)$$

Следовательно, при $\bar{\alpha} = 0$ слой растет при любом отличном от нуля положительном температурном перепаде ΔT , при $\bar{\alpha} \neq 0$ величина ΔT должна быть конечна, причем тем больше, чем больше отношение (l/r) . Так, при $(l/r) \ll 1$ имеем $\tau \approx 2\bar{\alpha}(l/r)$, при $(l/r) \gg 1$ — $\tau \approx 2\bar{\alpha}/(1 - \bar{\alpha})$, при $(l/r) = 1$ — $1.26\bar{\alpha}/(1 - 0.63\bar{\alpha})$.

Таким образом, с точки зрения создания температурного градиента также выгодно иметь геометрию ростовой ячейки, удовлетворяющую соотношению $l/r \leq 1$. Естественно, при этом требуется также малость коэффициента прилипания $\bar{\alpha}$.

Влияние расположения подложки относительно индукционной катушки на ее температуру

В табл. 1 представлена экспериментальная зависимость температуры подложки $T_l(r)$ при разных значениях тока I_a . Ордината $z = 0$ соответствует минимально допустимому положению подложки относительно низа индуктора. Шаг подъема подложки по оси z равен 5 mm. Теперь попытаемся получить теоретическую зависимость, для чего воспользуемся результатами работы [8]. Будем рассматривать только установившуюся температуру, отбрасывая в уравнениях все временные производные, и формально положим параметр κ_{gas} , отвечающий теплопроводности аргона, равный нулю, так как мы имеем дело не с аргоном, а с вакуумом. Тогда вместо системы уравнений (1.1) из [8] имеем

$$\text{div}(\kappa \cdot \text{grad } T) = -\mu, \quad (10)$$

где κ — теплопроводность кристаллического SiC; μ — удельная (на единицу объема) тепловая мощность, получаемая за счет индукционного нагрева. Здесь и в дальнейшем нижний температурный индекс l опускаем. Будем интересоваться только изменением температуры в направлении z , совпадающем с осью установки. Тогда, предполагая, что κ не является функцией z , получим

$$\frac{d^2 T(z)}{dz^2} = -\mu/\kappa \equiv -a. \quad (11)$$

Введем параметр z^* , определив его с помощью соотношения $(dT/dz)_{z^*} = 0$, отвечающий положению ростовой ячейки, при котором для данного значения тока I_a достигается максимальная температура подложки T_{max} . Обозначим температуру, отвечающую значению $z = 0$, через Θ (ясно, что Θ является функцией I_a). Тогда получим окончательно

$$T = T_{\text{max}} - (T_{\text{max}} - \Theta)(1 - z/z^*)^2. \quad (12)$$

Отметим, что

$$a = 2(T_{\text{max}} - \Theta)/(z^*)^2. \quad (13)$$

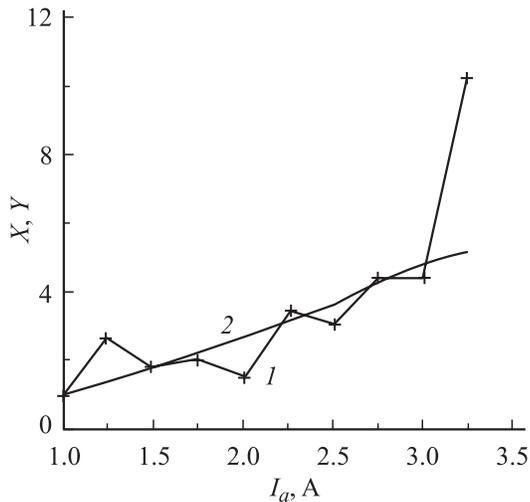


Рис. 2. Зависимость $X = a(I_a)/a(I_a = 1 \text{ A})$ (1), $Y = I_a^2 \kappa_1 / (I_a = 1 \text{ A})^2 \kappa$ (2) от тока I_a (A).

Определяя значения z^* , T_{\max} и Θ из экспериментальных зависимостей T_l в функции от тока I_a (не приводятся), мы рассчитали температуру подложки $T_l(z)$ (табл. 1). Для первых трех случаев ($I_a = 1, 2$ и 3 A) согласие следует признать отличным, тогда как при $I_a = 3.25 \text{ A}$ в области $z > z^*$ наш расчет дает заниженные значения T_l . Обращает на себя внимание и асимметричный характер зависимости $T_l(z)$ при $I_a = 3.25 \text{ A}$.

На рис. 2 представлено отношение коэффициентов a (см. (13)) вида $X = a(I_a)/a(I_a = 1 \text{ A})$ в функции от тока I_a (кривая 1). Так как $a \propto \mu$ (см. (11)), а удельная тепловая мощность μ , согласно [8], пропорциональна квадрату тока, здесь же мы привели зависимость отно-

шения $Y = I_a^2 \kappa_1 / (I_a = 1 \text{ A})^2 \kappa$ от I_a (кривая 2). Здесь κ_1 обозначает коэффициент теплопроводности, отвечающий температуре Θ , соответствующей $I_a = 1 \text{ A}$, коэффициент κ соответствует температурам Θ для значений $I_a = 1.25, 1.5 \text{ A}$ и т.д. (табл. 2). Данные по температурной зависимости теплопроводности 6H-SiC брались из работы [9].

Как видно из рис. 2, с учетом грубости приближений кривые 1 и 2 достаточно хорошо согласуются друг с другом в области $1 \leq I_a \leq 3 \text{ A}$ и сильно (в 2 раза) расходятся при $I_a = 3.25 \text{ A}$. Причины такого расхождения в настоящее время не ясны.

Работа выполнена при частичной поддержке грантов РФФИ-03-02-160546, РФФИ-04-02-16632, INTAS-01-0603 и NATO SfP N 978011.

Список литературы

- [1] Жмакин А.И., Макаров Ю.Н., Офенгейм Д.Х., Рамм М.С. // Вопросы математической физики и прикладной математики. СПб.: ФТИ РАН, 2001. С. 208–234.
- [2] Selder M., Kadinsky L., Durst F. // Там же, С. 235–252.
- [3] Kaldis E., Piechotka M. // Handbook of Crystal Growth. 1994. Vol. 2. P. 615–656.
- [4] Jensen K.F. // Ibid. Vol. 3. P. 543–599.
- [5] Давыдов С.Ю., Лебедев А.А., Савкина Н.С., Суваярви М., Якимова Р. // ФТП. 2004. Т. 38. Вып. 2. С. 153–155.
- [6] Savkina N.S., Levedev A.A., Davydov D.V., Strel'nik A.M., Tregubova A.S., Raynand C., Chante J.-P., Locatelli M.-L., Planson D., Milan J., Godignon P., Campos F.J., Mestres N., Pascual J., Brezeanu G., Badila V. // Materials Science and Engineering, 2000. Vol. B61–62. P. 50–54.
- [7] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Физическая кинетика. М.: Наука, 1979. 527 с.
- [8] Klein O., Philip P. // J. Crystal Growth. 2003. Vol. 247. N 1–3. P. 219–235.
- [9] Nilsson O., Mehling H., Horn R., Fricke J., Hoffman R., Muller S.G., Eckstein R., Hoffman D. // High Temper.–High Pressure. 1E. Vol. 29. N 1. P. 73–79.

Таблица 2. Расчет температуры подложки T_l ($^{\circ}\text{C}$) для различных значений тока I_a (A) в функции от положения z (mm) подложки относительно индуктора

z	0	5	10	15	20	25	30	35	37.5
$I_a = 1 \text{ A}, z^* = 35 \text{ mm}, \Theta = 900^{\circ}\text{C}, T_{\max} = 924^{\circ}\text{C}$									
T_l^{theor}	900	906	912	916	920	922	924	924	924
T_l^{exp}	900	905	909	914	914	919	924	924	924
$I_a = 2 \text{ A}, z^* = 32.5 \text{ mm}, \Theta = 1294^{\circ}\text{C}, T_{\max} = 1326^{\circ}\text{C}$									
T_l^{theor}	1294	1303	1311	1317	1322	1324	1326	1326	1325
T_l^{exp}	1294	1294	1306	1313	1319	1324	1326	1326	1324
$I_a = 3 \text{ A}, z^* = 25 \text{ mm}, \Theta = 1594^{\circ}\text{C}, T_{\max} = 1648^{\circ}\text{C}$									
T_l^{theor}	1594	1613	1629	1639	1646	1648	1646	1639	1635
T_l^{exp}	1594	1616	1627	1643	1643	1648	1643	1638	1632
$I_a = 3.25 \text{ A}, z^* = 15 \text{ mm}, \Theta = 1720^{\circ}\text{C}, T_{\max} = 1765^{\circ}\text{C}$									
T_l^{theor}	1720	1745	1760	1765	1760	1745	1720	1685	1664
T_l^{exp}	1720	1750	1760	1765	1760	1755	1750	1735	1725