

## АНАЛИЗ ТОЧЕЧНОГО ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ В ГОМОГЕННОЙ ФАЗЕ $SiC$ ФОРМИРУЮЩЕЙСЯ В ПРОЦЕССЕ ЭНДОТАКСИИ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ $SiC/Si$

© 2007 В.И. Чепурнов, К.П. Сивакова<sup>1</sup>

Гетероэпитаксиальные пленки карбида кремния на кремниевой подложке являются перспективным материалом высокотемпературной электроники. В данной работе выполнен анализ точечного дефектообразования в гомогенной фазе  $\beta-SiC$ , формирующейся за счет матрицы кремния и углеводородов газовой фазы в интервале температур 1360–1380 °С при нормальном давлении.

### 1. Проблемные задачи и моделирование физико-химических процессов эндотаксии гетероструктур $\beta-SiC-Si$

Гетероэпитаксиальные структуры  $\beta-SiC-Si$  имеют существенный потенциал надежности для разрабатываемых приборов высокотемпературной электроники [1–3], в частности, преобразователей физических величин. Моделирование физико-химического механизма роста пленок и моделирование физического принципа работы полупроводникового прибора определяют возможность его создания, и эта взаимосвязь обусловлена особенностями сопряжения пленки и подложки при различных механизмах формирования пленки. Целью настоящей работы является моделирование процесса гетероэндотаксии кубического карбида кремния за счет матрицы монокристаллического кремния. Процесс протекает в системе  $(Si-C-H)$ , а в случае легирования, которое осуществляется в процессе роста в системе  $(Si-C-H-примесь)$ . Подложки кремния, установленные в кассете-подложкодержателе из карбидизированного углерода экспонируются в потоке водорода, содержащем углеводороды, кремневодороды, и соединений (или атомов) легирующей примеси. Углеводороды образуются в зоне кассеты с температурой более низкой, чем в зоне формирования пленки кубического карбида кремния, исходным материалом для образования углеводородов является углерод свободный или связанный с кремнием. В технологическом плане процесс прост, воспроизводим и контролируем, но твердофазные реакции, которые его сопровождают, достаточно сложны. В основу моделирования протекающих процессов положены работы Ю.Д. Третьякова [4], В.М. Чеботина [5], В.П. Ковтуненко [6].

Модель квазихимического описания гетероэндотаксии структуры  $\beta-SiC-Si$  с позиций физико-химических закономерностей обсуждается в настоящей работе.

<sup>1</sup>Чепурнов Виктор Иванович, Сивакова Ксения Петровна (sivakovakp@mail.ru), кафедра электроники твердого тела Самарского государственного университета, 443011, Россия, г. Самара, ул. Акад. Павлова, 1.

Согласно диаграмме "состав-свойство" для системы  $Si-C$  при температуре роста пленки, кремний и углерод вместе не сосуществуют, однако в моделируемой системе имеется диффузионный барьер в виде твердофазного  $\beta-SiC$ , как это изображено схематически на рис. 1.

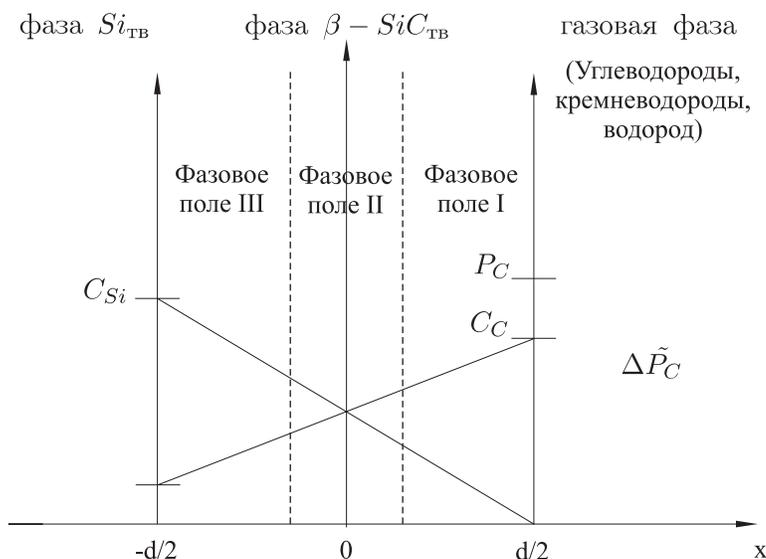


Рис. 1. Схематическая модель стационарного распределения компонентов системы  $Si-C-H$

На рис. 1  $\Delta \tilde{P}_C$  — переусищение углеводородной газовой фазы по атомам углерода;  $C_{Si}$  — концентрация кремния на фазовой границе со стороны  $Si_{ТВ}$ ;  $P_C$  — поверхностная концентрация адсорбированных молекул углеводородов на  $\beta-SiC_{ТВ}$ ;  $C_C$  — поверхностная концентрация углерода со стороны  $\beta-SiC_{ТВ}$ ;  $\pm \frac{d}{2}$  — координаты гомогенной области  $\beta-SiC_{ТВ}$ .

## 2. Ростовые точечные дефекты

Отображение процесса встраивания атомов углерода со стороны газовой фазы в кристаллическую решетку кубического карбида кремния можно, согласно принципу постоянства отношения количества разнородных узлов кристаллической решетки, записать в виде квазихимического уравнения, протекающего на гетерогенной поверхности кристаллической фазы  $\beta-SiC$



где  $O$  — условное обозначение исходной, совершенной кристаллической решетки гомогенной области  $\beta-SiC$ ;  $C_{\Gamma}$  — концентрация хемосорбированного атома углерода на поверхности совершенной фазы  $\beta-SiC$ , пропорциональная переусищению по атомам углерода  $\Delta \tilde{P}_C$  в газовой фазе;  $C_C$  — атом углерода, встроившийся в подрешетку углерода фазы  $\beta-SiC$ ;  $V_{Si}^{4-}$  — вакансия, заряженная отрицательно в подрешетке кремния;  $h$  — локализованные дырки в области заряженной вакансии  $V_{Si}^{4-}$  в соответствии с принципом электронейтральности кристалла.

В соответствии с законом действующих масс константу равновесия процесса, представленного уравнением (1), можно записать в виде выражения

$$K_{V_{Si}^{4-}} = \frac{X_{V_{Si}^{4-}} \cdot p^4}{\Delta \tilde{P}_C}, \quad (2)$$

где  $K_{V_{Si}^{4-}}$  — изотермическая константа равновесия, характеризующая сдвиг обратимого процесса, представленного уравнением (1);  $X_{V_{Si}^{4-}}$  — концентрация отрицательно заряженных вакансий в подрешетке кремния гомогенной фазы  $\beta - SiC$ ;  $p$  — концентрация дырок, локализованных в окрестности вакансий  $V_{Si}^{4-}$ , способных образовывать акцепторные уровни в запрещенной зоне карбида кремния;  $\Delta \tilde{P}_C$  — пересыщение углеводородной газовой фазы по атомам углерода.

Отображение процесса встраивания атомов кремния в гомогенную фазу кристаллического кубического карбида кремния со стороны фазовой границы с кремнием можно записать в виде выражения для квазихимического твердофазного процесса



где  $Si_T$  — атом кремния кристаллической решетки кремния на фазовой границе гомогенной области  $\beta - SiC$  со стороны гомогенной фазы  $Si$ ;  $Si_{Si}$  — атом кремния, встроившийся в подрешетку кремния гомогенной фазы  $\beta - SiC$ ;  $V_C^{4+}$  — положительная вакансия в подрешетке углерода (степень ионности ковалентной связи  $SiC$  составляет 12%);  $\bar{e}$  — локализованные электроны в области  $V_C^{4+}$ , способные при определенных концентрациях образовывать донорные уровни в запрещенной зоне кубического карбида кремния.

В соответствии с законом действующих масс константу равновесия процесса (3) можно записать в виде выражения

$$K_{V_C^{4+}} = \frac{X_{V_C^{4+}} \cdot n^4}{a_{Si}}, \quad (4)$$

где  $K_{V_C^{4+}}$  — константа равновесия обратимого процесса;  $X_{V_C^{4+}}$  — концентрация вакансий углерода в подрешетке углерода гомогенной фазы  $\beta - SiC$ ;  $n$  — концентрация электронов, локализованных в области  $V_C^{4+}$ ;  $a_{Si}$  — активность атомов кремния на границе с гомогенной фазой  $\beta - SiC$  со стороны матрицы  $Si$ .

Все типы ростовых дефектов распределены в фазовых полях области гомогенности карбида кремния неоднородно:

1. Область фазового поля I характеризуется тем, что со стороны газовой фазы гомогенная фаза  $\beta - SiC$  испытывает пересыщение по атомам углерода ( $\Delta \tilde{P}_C$ ) на гетерогенной границе. По данным термодинамического расчета, выполненного для этой системы, оно составляет  $\Delta \tilde{P}_C = 0,014$  Па, при гипотетическом давлении атомов углерода в зоне осаждения оно равно  $10^4$  Па.

Недосыщение по атомам кремния на той же гетерогенной границе составляет  $\Delta \tilde{P}_C = 0,02$  Па. Эти обстоятельства приводят к протеканию процесса, представленного уравнением (1). Концентрация образующихся квазичастиц и их соотношение для этой области

$$X_{V_C^{4+}} \ll X_{V_{Si}^{4-}} \quad \text{и} \quad n \ll p. \quad (5)$$

2. Область фазового поля III характеризуется тем, что со стороны фазовой границы "кремний-карбид кремния" растущая гомогенная фаза испытывает воздействие атомарного кремния на гетерогенной границе с матрицей кремния. Твердофазные высокотемпературные процессы можно представить выражением (3),

концентрация образующихся квазичастиц и их соотношение в рассматриваемой области

$$X_{V_C^{4+}} \gg X_{V_{Si}^{4-}} \quad \text{и} \quad n \gg p. \quad (6)$$

3. Область фазового поля II характеризуется тем, что эта область узкая и в пределе представляет область, в которой соотношение кристаллографических узлов подрешеток кремния и углерода эквивалентно соотношению концентраций ростовых дефектов, для которых условие электронейтральности

$$X_{V_C^{4+}} \simeq X_{V_{Si}^{4-}} \quad \text{и} \quad n \simeq p. \quad (7)$$

### 3. Тепловые точечные дефекты

Наряду с ростовыми дефектами в области гомогенности карбида кремния образуются тепловые дефекты по Шоттки и Френелю, в том числе и стимулированные механическими напряжениями в сопряженных фазах, так как несоответствие параметров решетки составляет около 20%. Тепловые и ростовые дефекты могут взаимодействовать между собой.

Рассмотрим тепловые дефекты по Шоттки. Во второй области фазового поля карбида кремния, в которой возможны процессы теплового разупорядочения,



где  $O$  — отображение исходного карбида кремния в области гомогенности при температуре 0 К;  $V_C$  и  $V_{Si}$  — соответственно вакансии в подрешетке углерода и кремния при отличной от 0 К температуре. Константа равновесия процесса (8)

$$K_{III} = X_{V_C} X_{V_{Si}}, \quad (2)$$

где  $X_{V_C}$  и  $X_{V_{Si}}$  — соответственно концентрация неионизованных дефектов по Шоттки.

С повышением температуры области гомогенности карбида кремния дефекты по Шоттки ионизируются



Константа равновесия этого процесса

$$K_{V_C^{4+}} = \frac{X_{V_C^{4+}} \cdot n^4}{X_{V_C}}. \quad (4)$$

Соответственно ионизируются квазичастицы вакансий на месте атомов кремния



Константа равновесия этого процесса

$$K_{V_{Si}^{4-}} = \frac{X_{V_{Si}^{4-}} \cdot p^4}{X_{V_{Si}}}. \quad (6)$$

Константа равновесия ионизированных дефектов по Шоттки во второй области гомогенной фазы  $\beta - SiC$  может быть определена из уравнения процесса



где  $0$  — отображение структурно совершенного бездефектного кристалла  $\beta - SiC$ ;  $V_{Si}^{4-}$  — заряженная вакансия в подрешетке кремния гомогенной фазы  $\beta - SiC$ ;  $V_C^{4+}$  — заряженная вакансия в подрешетке углерода гомогенной фазы  $\beta - SiC$ .

Константа равновесия этого процесса

$$K'_{III} = X_{V_{Si}^{4+}} X_{V_C^{4+}}. \quad (8)$$

Процессы теплового разупорядочения, обусловленные переходами носителей из валентной зоны в зону проводимости, можно представить как квазихимические процессы в виде



где  $O$  — исходное состояние структурно-совершенной фазы  $\beta$ - $SiC$  при температуре абсолютного нуля. Константа равновесия процесса (16)

$$K_i = np. \quad (10)$$

#### 4. Взаимодействие тепловых и ростовых дефектов

Тепловое разупорядочение в первой фазовой области гомогенной фазы карбида кремния будет иметь свои особенности, обусловленные причиной образования ростовых дефектов в виде квазичастиц, представленных соотношением (5). В отличие от второй области процесс образования вакансий (10) по Шоттки в подрешетке углерода гомогенной фазы карбида кремния будет подавлен, а процесс (12) будет инициирован.

Тепловые дефекты в третьей фазовой области гомогенной фазы карбида кремния будут иметь свои особенности, обусловленные причиной образования ростовых дефектов в виде квазичастиц, представленных соотношением (6). Процесс теплового разупорядочения по Шоттки по уравнению (12) будет подавлен, а по уравнению (10) инициирован.

Рассмотрим еще одну модель — это модель теплового разупорядочения по Френкелю в гомогенной области кубического карбида кремния. Во второй области гомогенной фазы разупорядочение можно представить квазихимическим процессом



где  $O$  — отображение совершенной структуры гомогенной фазы кубического карбида кремния при температуре абсолютного нуля;  $V_C$  и  $V_{Si}$  — соответственно вакансии в подрешетке углерода и кремния при отличной от 0 К температуре;  $C_i$  и  $S_{i_i}$  — соответственно атомы в междоузлии кристаллической решетки карбида кремния. Константу равновесия процесса (18) можно представить выражением

$$K_{\phi p} = X_{V_C} X_{C_i} X_{V_{Si}} X_{S_{i_i}}, \quad (2)$$

где  $X_{V_C}$  и  $X_{V_{Si}}$  — соответственно концентрации вакансий углерода и кремния в кристаллической решетке кубического карбида кремния;  $X_{C_i}$  и  $X_{S_{i_i}}$  — соответственно концентрации атомов в междоузлиях кристаллической решетки  $SiC$ .

При температуре эндотаксии карбида кремния атомы в междоузлиях способны к ионизации



где  $C_i^{4-}$  — отрицательно заряженный атом углерода в междоузлии;  $h$  — локализованная дырка в области отрицательно заряженного атома углерода в междоузлии.

Константу равновесия процесса (20) можно представить выражением

$$K'_i = \frac{X_{C_i^{4-}} \cdot p^4}{X_{C_i}}. \quad (4)$$

Соответственно процесс ионизации атомов кремния в междоузлии можно записать в виде выражений

$$Si_i \rightleftharpoons Si_i^{4+} + 4\bar{e}, \quad (5)$$

$$K_i' = \frac{X_{Si_i^{4+}} \cdot n^4}{X_{Si_i}}. \quad (6)$$

Тепловое разупорядочение кристалла с образованием дефектов по Френкелю в первой области гомогенной фазы SiC имеет отличительные особенности от дефектообразования по Френкелю во второй области. Преимущественный характер образования тепловых дефектов по Френкелю протекает согласно процессу (20).

Тепловое разупорядочение с образованием дефектов по Френкелю в третьей области гомогенной фазы карбида кремния протекает преимущественно согласно процессу (22).

Таким образом, процесс гетероэндотаксии кубического карбида кремния в матрицу кремния сопровождается образованием ростовых и тепловых дефектов. Квазичастицы, носители всех видов дефектов в условиях термодинамического равновесия, заселяют кристалл. Оценим концентрации всех видов квазичастиц в каждой области гомогенной фазы кубического карбида кремния.

## 5. Анализ взаимодействия ростовых и тепловых дефектов по Шоттки

Рассмотрим закономерность распределения квазичастиц в первой области гомогенной фазы  $\beta$ -SiC, граничащей с газовой фазой для случая взаимодействия ростовых и тепловых дефектов по Шоттки. Уравнение электронейтральности для процесса (1) можно записать в виде

$$4X_{V_{Si}^{4-}} = p. \quad (1)$$

После подстановки (24) в уравнение (2) получим концентрацию заряженных вакансий на месте атомов кремния в подрешетке кремния гомогенной фазы  $\beta$ -SiC в зависимости от пересыщения по атомам углерода в газовой фазе

$$X_{V_{Si}^{4-}} = \frac{1}{4}p = 4^{-\frac{4}{5}}(K_{V_{Si}^{4-}})^{\frac{1}{5}}(\Delta\tilde{P}_C)^{\frac{1}{5}}. \quad (2)$$

Для первой области гомогенной фазы кубического карбида кремния определим закономерность распределения дефектов в подрешетке углерода в зависимости от пересыщения по атомам углерода в газовой фазе. Концентрация заряженных вакансий в подрешетке углерода гомогенной фазы  $\beta$ -SiC из (15)

$$X_{V_C^{4+}} = \frac{K'_{III}}{X_{V_{Si}^{4-}}} = \frac{4^{\frac{4}{5}}K'_{III}}{(K_{V_{Si}^{4-}})^{\frac{1}{5}}(\Delta\tilde{P}_C)^{\frac{1}{5}}}. \quad (3)$$

Совместное решение уравнений (25) и (17) позволяет определить закономерность распределения таких элементарных квазичастиц, как электронов

$$n = \frac{K_i}{p} = 4^{\frac{1}{5}}K_i(K_{V_{Si}^{4-}})^{-\frac{1}{5}}(\Delta\tilde{P}_C)^{-\frac{1}{5}}. \quad (4)$$

Таким образом, концентрации квазичастиц в первой области гомогенной фазы  $\beta$ -SiC в обобщенном виде можно представить выражениями:

$$X_{V_{Si}^{4-}} = K(\Delta\tilde{P}_C)^{\frac{1}{5}}, \quad (5)$$

$$p = K(\Delta\tilde{P}_C)^{\frac{1}{5}},$$

$$X_{V_C^{4+}} = K(\Delta\tilde{P}_C)^{-\frac{1}{5}}, \quad (6)$$

$$n = K(\Delta\tilde{P}_C)^{-\frac{1}{5}}, \quad (7)$$

где  $K$  — обобщенная константа равновесия.

Выражения (28–30) позволяют выявить закономерности распределения квазичастиц — дефектов кристаллической решетки гомогенной фазы как функции перенасыщения по атомам углерода в газовой фазе над растущей пленкой в I области гомогенной фазы.

Рассмотрим закономерность распределения квазичастиц в третьей области гомогенной фазы  $\beta - SiC$ , граничащей с гомогенной фазой кремния (матрицей), в частности, случай взаимодействия ростовых и тепловых дефектов по Шоттки.

Уравнение электронейтральности процесса ростового дефектообразования (3)

$$4X_{V_C^{4+}} = n. \quad (8)$$

После подстановки (31) в уравнение (4)

$$X_{V_C^{4+}} = 4^{-\frac{4}{5}}(K_{V_C^{4+}})^{\frac{1}{5}}(a_{Si})^{\frac{1}{5}} = \frac{1}{4}n, \quad (9)$$

получаем зависимость концентрации заряженных вакансий атомов углерода в подрешетке кремния гомогенной фазы  $\beta - SiC$ .

Концентрация вакансий в подрешетке кремния гомогенной фазы  $\beta - SiC$  определяется с учетом выражения для концентрации тепловых дефектов (15)

$$X_{V_{Si}^{4-}} = \frac{K'_{III}}{X_{V_C^{4+}}} = \frac{4^{\frac{4}{5}}K'_{III}}{(K_{V_C^{4+}})^{\frac{1}{5}}(a_{Si})^{\frac{1}{5}}}. \quad (10)$$

Для анализа зависимости концентрации квазичастиц, дефекты удобнее выражать через единый управляющий параметр — это пересыщение газовой фазы по атомам углерода. С этой целью воспользуемся уравнением умозрительного вероятного процесса разложения карбида кремния во второй области гомогенной фазы, граничащей с I и III областями



Константа равновесия этого процесса

$$K_P = X_C X_{Si}. \quad (12)$$

Концентрацию атомов углерода в выражении (34) можно рассматривать как величину, пропорциональную пересыщению по атомам углерода, т.е.  $X_C \equiv \Delta\tilde{P}_C$ , а концентрацию атомов кремния как величину, эквивалентную активности атомов кремния на фазовой границе, т.е.  $X_{Si} \equiv a_{Si}$ , в таком случае выражение (35) можно переписать в виде

$$K_P \cong (\Delta\tilde{P}_C)a_{Si}. \quad (13)$$

Подставив (36) в выражение (33), получим концентрацию заряженных вакансий на месте атомов кремния в зависимости от пересыщения газовой фазы по атомам углерода ( $\Delta\tilde{P}_C$ )

$$X_{V_{Si}^{4-}} = \frac{4^{\frac{4}{5}}(K'_{III})(\Delta\tilde{P}_C)^{\frac{1}{5}}}{(K_{V_C^{4+}})^{\frac{1}{5}}(K_P)^{\frac{1}{5}}}. \quad (14)$$

Концентрация заряженных вакансий на месте атомов углерода по уравнению (32) с учетом (36) запишется в виде выражения

$$X_{V_C^{4+}} = 4^{-\frac{1}{5}} (K_{V_C^{4+}})^{\frac{1}{5}} (K_P)^{\frac{1}{5}} (\Delta \tilde{P}_C)^{-\frac{1}{5}} = \frac{1}{4} n. \quad (15)$$

Концентрацию квазичастиц (дырок) можно определить из совместного решения уравнений (38) и (23)

$$p = 4^{\frac{1}{5}} K_i (K_{V_C^{4+}})^{-\frac{1}{5}} (K_P)^{-\frac{1}{5}} (\Delta \tilde{P}_C)^{\frac{1}{5}}. \quad (16)$$

Таким образом, для третьей области гомогенной фазы  $\beta$ -SiC в обобщенном виде можно переписать зависимость концентрации квазичастиц-дефектов от пересыщения газовой фазы по атомам углерода

$$X_{V_C^{4+}} = K (\Delta \tilde{P}_C)^{-\frac{1}{5}}, \quad (17)$$

$$n = K (\Delta \tilde{P}_C)^{-\frac{1}{5}},$$

$$X_{V_{Si}^{4-}} = K (\Delta \tilde{P}_C)^{\frac{1}{5}}, \quad (18)$$

$$p = K (\Delta \tilde{P}_C)^{\frac{1}{5}}. \quad (19)$$

Определим закономерности изменения концентрации квазичастиц (дефектов) для узкой второй области в гомогенной фазе кубического карбида кремния. Концентрация ростовых дефектов в этой области представлена соотношением (7).

Уравнение электронейтральности для случая Шоттковского беспорядка может быть получено из выражений (10) и (12)

$$X_{V_{Si}^{4-}} = X_{V_C^{4+}}, \quad (20)$$

$$n = p. \quad (21)$$

Для случая, когда  $K'_{III} > K_i$ , применяем условие (43) и тогда имеем из (15)

$$X_{V_{Si}^{4-}} = X_{V_C^{4+}} = (K'_{III})^{\frac{1}{2}}. \quad (22)$$

Совместное решение выражений (45) и (2) позволяет определить концентрацию дырок

$$p = (K_{V_{Si}^{4-}})^{\frac{1}{4}} (K'_{III})^{-\frac{1}{8}} (\Delta \tilde{P}_C)^{\frac{1}{4}}. \quad (23)$$

Концентрация электронов может быть определена с учетом выражения (17)

$$n = K_i (K_{V_{Si}^{4-}})^{-\frac{1}{4}} (K'_{III})^{\frac{1}{8}} (\Delta \tilde{P}_C)^{-\frac{1}{4}}. \quad (24)$$

Для случая, когда  $K'_{III} < K_i$ , применяем условие (44) и тогда имеем из (17)

$$n = p = (K_i)^{\frac{1}{2}}. \quad (25)$$

Решая уравнения (4), (36) и (48), получим

$$X_{V_C^{4+}} = (K_{V_C^{4+}}) K_P K_i^{-2} (\Delta \tilde{P}_C)^{-1}. \quad (26)$$

Решая совместно уравнения (2), (48), получим

$$X_{V_{Si}^{4-}} = (K_{V_{Si}^{4-}}) K_i^{-2} (\Delta \tilde{P}_C). \quad (27)$$

Полученные закономерности для второй области гомогенности кубического карбида кремния могут быть записаны в обобщенном виде для случая, когда  $K'_{III} > K_i$ :

$$X_{V_{Si}^{4-}} = X_{V_C^{4+}} = K, \quad (28)$$

$$p = K(\Delta\tilde{P}_C)^{\frac{1}{4}}, \quad (29)$$

$$n = K(\Delta\tilde{P}_C)^{-\frac{1}{4}} \quad (30)$$

а, когда  $K'_{III} < K_i$ , то концентрации дефектов в обобщенном виде можно записать таким образом:

$$n = p = K, \quad (31)$$

$$X_{V_{Si}^{4+}} = K(\Delta\tilde{P}_C), \quad (32)$$

$$X_{V_c^{4+}} = K(\Delta\tilde{P}_C)^{-1}, \quad (33)$$

где  $K$  — обобщенная константа равновесия.

Таким образом, в соответствии с квазихимическим представлением процессов, протекающих в твердом теле на примере моделирования эндотаксии  $\beta - SiC$  на кремнии в системе  $Si - C - H$ , выявлены закономерности дефектообразования во всех областях гомогенной фазы  $\beta - SiC$ . Закономерности можно представить в графическом виде в координатах "логарифм концентрации дефектов — логарифм пересыщения по атомам углерода" на рис. 2.

Моделируемый процесс дефектообразования идеализированный, т.е. имеет ряд допущений, в том числе не учитывается фактор остаточных механических напряжений при сопряжении фазовых областей  $\beta - SiC$  и  $Si$ , у которых отличие параметров решетки составляет 20%, не учитывается влияние сетки дислокаций как результат релаксации механических напряжений до остаточных и др.

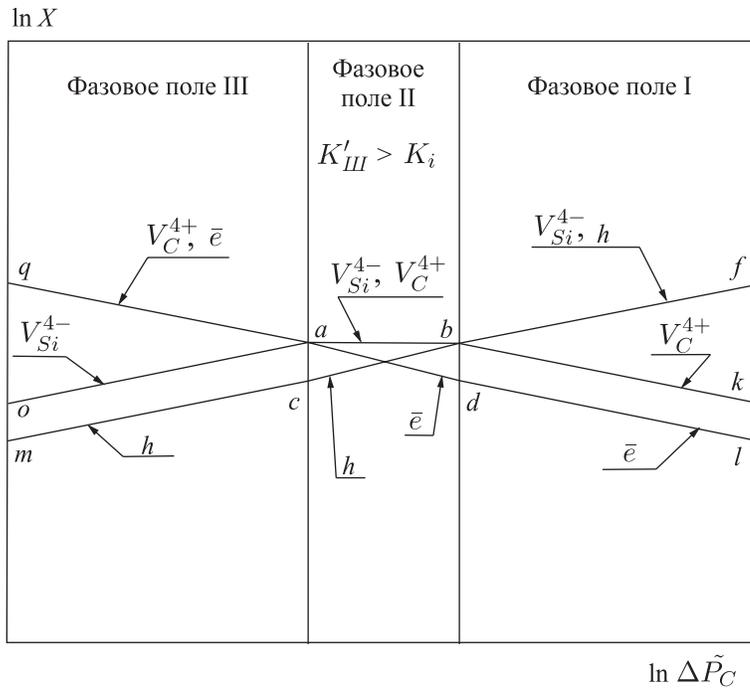


Рис. 2. Зависимость концентрации четырехкратно ионизированных равновесных дефектов ростовых и тепловых по Шоттки в гомогенной области  $\beta - SiC$  от пересыщения по атомам углерода в газовой фазе над  $\beta - SiC$

Методика построения графиков следующая. Целесообразно начать построение со второй области гомогенной фазы  $\beta - SiC$ , в которой согласно выражению (51) для случая  $K'_{III} > K_i$  имеем соответственно  $X_{V_{Si}^{4+}} = K$ .

Концентрационный уровень дефектов  $X_{V_{Si}^{4-}}$  не зависит от пересыщения по углероду ( $\Delta\tilde{P}_C$ ) и характеризуется отрезком прямой  $ab$ , точки  $a$  и  $b$  определяют границы электронейтральности. Эти границы достаточно узки и в предельном случае, когда  $n = p$  совпадают.

Справа от точки  $b$  применимо условие электронейтральности процесса (1), для которого

$$X_{V_{Si}^{4-}} = p. \quad (24)$$

Слева от точки  $a$  применимо условие электронейтральности процесса (3), для которого

$$X_{V_C^{4+}} = n. \quad (31)$$

Со стороны газовой фазы для гомогенной фазы  $\beta$ -SiC зависимость концентрации заряженных вакансий на месте атомов кремния от пересыщения по атомам углерода представлена выражением

$$\begin{aligned} X_{V_{Si}^{4-}} &= K(\Delta\tilde{P}_C)^{\frac{1}{5}}, \\ p &= K(\Delta\tilde{P}_C)^{\frac{1}{5}}, \end{aligned} \quad (28)$$

Точка  $b$  является общей для первой и второй области гомогенной фазы  $\beta$ -SiC, поэтому при нанесении на график в координатах  $\ln X - \ln(\Delta\tilde{P}_C)$  прямые, описываемые уравнением (28) и (51), пересекутся.

Согласно аналогичным рассуждениям для точки  $a$ , в ней пересекутся прямые, описываемые уравнениями (51) и (41).

Поскольку угол наклона прямых (28) и (41) известен и в обоих случаях он составляет  $1/5$ , то информация о положении точек  $a$  и  $b$  достаточна для того, чтобы эти прямые нанести на график — это линии  $ao$  и  $bf$ , для которых справедливо выражение в обобщенном виде

$$\ln X_{V_{Si}^{4-}} = \ln K + \frac{1}{5} \ln(\Delta\tilde{P}_C). \quad (34)$$

В первой области гомогенной фазы  $\beta$ -SiC согласно выражению (1) образование вакансий в подрешетке кремния сопровождается образованием дырок, которые рассматриваются как структурный дефект акцепторного типа. При достаточной концентрации дырок образуется уровень в запрещенной зоне  $\beta$ -SiC. Их концентрация равна концентрации вакансий  $X_{V_{Si}^{4-}}$  согласно выражению (28), поэтому прямые, отображающие их концентрации, совпадают на участке  $bf$

$$\ln p = \ln K + \frac{1}{5} \ln(\Delta\tilde{P}_C). \quad (35)$$

Термодинамическое распределение дефектов в третьей области гомогенной фазы  $\beta$ -SiC для ионизованных дефектов можно представить графически.

Уровень вакансий в подрешетке углерода во второй области в соответствии с выражением (51) соответствует отрезку прямой  $ab$ , у которой точки  $a$  и  $b$  определяют границы условия электронейтральности, т.е. вторая область достаточно узкая

$$X_{V_{Si}^{4-}} = X_{V_C^{4+}} = K. \quad (51)$$

Слева от точки  $a$  применимо условие электронейтральности в соответствии с выражением (40)

$$X_{V_C^{4+}} = K(\Delta\tilde{P}_C)^{-\frac{1}{5}}. \quad (36)$$

Кроме того, зависимость концентрации  $X_{V_c^{4+}}$  от пересыщения системы от гипотетического давления углерода подчиняется той же закономерности.

Точка  $a$  является общей для второй и третьей области гомогенной фазы  $\beta-SiC$ , очевидно, что при нанесении на график зависимостей (51) и (40) в координатах  $\ln X - \ln(\Delta\tilde{P}_C)$  они пересекутся. Имеем

$$\ln X_{V_c^{4+}} = \ln K, \quad (37)$$

$$\ln X_{V_c^{4+}} = \ln K - \frac{1}{5} \ln(\Delta\tilde{P}_C). \quad (38)$$

В точке  $b$  пересекаются зависимости концентрации вакансий в подрешетке углерода для второй и первой областей соответственно (51) и (29), их представление в координатах  $\ln X_{V_c^{4+}} - \ln(\Delta\tilde{P}_C)$

$$\ln X_{V_c^{4+}} = \ln K, \quad (60)$$

$$\ln X_{V_c^{4+}} = \ln K - \frac{1}{5} \ln(\Delta\tilde{P}_C). \quad (39)$$

На рис. 2 это линии  $aq$  и  $bk$ .

Образование ростовых дефектов влияет на концентрацию электронов, так как последние локализуются в области вакансий в подрешетке углерода, и если концентрация вакансий достаточно высокая, то возможно образование донорного уровня в запрещенной зоне  $\beta-SiC$  в третьей области гомогенной фазы.

Концентрация электронов в соответствии с выражением (40) совпадает с концентрацией  $X_{V_c^{4+}}$  — это линии  $aq$

$$\ln n = \ln K - \frac{1}{5} \ln(\Delta\tilde{P}_C). \quad (40)$$

При переходе во вторую область гомогенной фазы  $\beta-SiC$  зависимость имеет вид, соответствующий выражению (53)

$$\ln n = \ln K - \frac{1}{4} \ln(\Delta\tilde{P}_C). \quad (41)$$

На графике рис. 2 это линия  $ad$ .

При переходе в первую область гомогенной фазы  $\beta-SiC$  закономерность изменения концентрации электронов меняется в соответствии с выражением (30)

$$\ln n = \ln K - \frac{1}{5} \ln(\Delta\tilde{P}_C). \quad (42)$$

На рис. 2 эта зависимость нанесена в виде линии  $dl$ . Зависимость концентрации дырок во второй области гомогенности слева от точки  $b$  подчиняется закономерности (52)

$$\ln p = \ln K + \frac{1}{4} \ln(\Delta\tilde{P}_C). \quad (43)$$

На рис. 2 это линия  $bc$ . При переходе в третью область гомогенной фазы  $\beta-SiC$  вид закономерности меняется согласно выражению (42), на графике эта зависимость отображается линией  $cm$

$$\ln p = \ln K + \frac{1}{5} \ln(\Delta\tilde{P}_C). \quad (44)$$

Таким образом, случай взаимодействия ростовых и шоттковских дефектов (случай  $K'_{III} > K_i$ ) можно представить в виде брауэровских диаграмм концентрации взаимодействующих дефектов кристаллической структуры гомогенной фазы  $\beta-SiC$ . Информация о распределении дефектов имеет важное значение для объяснения механизмов диффузии атомов углерода и кремния к фазовым границам гомогенной фазы  $\beta-SiC$ .

## 6. Анализ взаимодействия ростовых точечных дефектов и тепловых по модели Френкеля

Комплексное теоретическое исследование твердофазных процессов, протекающих при формировании  $\beta-SiC$  методом эндотаксии на кремниевой подложке, расширяет представление о сложных механизмах протекающих процессов, поэтому целесообразно проанализировать взаимодействие дефектов по Френкелю с ростовыми дефектами при образовании фазы  $\beta-SiC$ .

В случае взаимодействия ростовых дефектов и тепловых дефектов по Френкелю при заданных температурах и давлениях равновесная концентрация дефектов определяется соответствующей константой равновесия протекающих процессов. Концентрации разных сортов дефектов взаимосвязаны, и любую из констант равновесия можно выразить через другую константу.

Рассмотрим процессы, протекающие в первом фазовом поле гомогенной фазы  $\beta-SiC$ . Особенность протекания процессов в нем заключается в том, что оно граничит с газовой фазой, для которой на основании термодинамического расчета в системе  $Si-C-H$  характерны пересыщение по атомам углерода и недосыщение по атомам кремния.

Для данных условий выражение (18) для тепловых дефектов по Френкелю, приведенное для II фазового поля, можно представить с учетом того, что условия для возникновения междуузельного атома углерода более вероятны, чем для междуузельного атома кремния. Процесс образования вакансий  $V_{Si}$  в ходе ростового механизма дефектообразования в соответствии с выражением (25) сдвигает равновесие образования дефектов по Френкелю в подрешетке кремния влево, поэтому для I фазового поля запишем

$$O \rightleftharpoons C_i + V_C, \quad (1)$$

где  $O$  — обозначение бездефектной фазы  $\beta-SiC$  при температуре абсолютного нуля;  $C_i$  — интерстициальный отрицательно заряженный атом углерода из подрешетки углерода;  $V_C$  — вакансия на месте атома углерода в подрешетке углерода.

Термодинамические дефекты по Френкелю ионизируются:

$$C_i \rightleftharpoons C_i^{4-} + 4h, \quad (20)$$

$$V_C \rightleftharpoons V_C^{4+} + 4\bar{e},$$

$$K'_i = \frac{X_{C_i^{4-}} \cdot p^4}{X_{C_i}}. \quad (21)$$

Соответственно уравнение электронейтральности дефектообразования по Френкелю можно записать в следующем виде

$$4X_{C_i^{4-}} + n = 4X_{V_C^{4+}} + p. \quad (2)$$

Особенности условий дефектообразования в I фазовом поле делают образование вакансий в углеродной подрешетке малоблагоприятными, и уравнение электронейтральности упрощается

$$4X_{C_i^{4-}} = p. \quad (3)$$

Из уравнения константы равновесия для ростового дефектообразования (2) и (24) и уравнения электронейтральности (70) получим

$$p = 4X_{C_i^{4-}} = 4^{\frac{1}{2}} (K_{V_{Si}^{4+}})^{\frac{1}{2}} (\Delta\tilde{P}_C)^{\frac{1}{2}}, \quad (4)$$

$$X_{C_i^{4-}} = 4^{-\frac{4}{5}} (K_{V_{Si}^{4-}})^{\frac{1}{5}} (\Delta \tilde{P}_C)^{\frac{1}{5}}. \quad (5)$$

Совместное решение уравнений (17) и (71) показывает закономерность изменения концентрации электронов в I фазовом поле:

$$n = \frac{K_i}{p} = 4^{-\frac{1}{5}} K_i (K_{V_{Si}^{4-}})^{-\frac{1}{5}} (\Delta \tilde{P}_C)^{-\frac{1}{5}}. \quad (6)$$

Из выражения для заряженных тепловых дефектов Френкеля

$$K'_{\phi p} = X_{C_i^{4-}} X_{V_C^{4+}} \quad (7)$$

получим концентрацию заряженных вакансий на месте атомов углерода:

$$X_{V_C^{4+}} = 4^{\frac{4}{5}} (K'_{\phi p}) (K_{V_{Si}^{4-}})^{-\frac{1}{5}} (\Delta \tilde{P}_C)^{-\frac{1}{5}}. \quad (8)$$

Концентрация вакансий на месте атомов кремния приведена в выражении (25) для ростовых дефектов, а концентрация междоузельных атомов кремния в под решетке кремния описывается выражением

$$O \rightleftharpoons V_{Si}^{4-} + Si_i^{4+},$$

его константа равновесия

$$K_{\phi p} = X_{V_{Si}^{4-}} X_{Si_i^{4+}},$$

$$X_{Si_i^{4+}} = \frac{K_{\phi p}}{X_{V_{Si}^{4-}}} = 4^{\frac{4}{5}} K_{\phi p} (K_{V_{Si}^{4-}})^{-\frac{1}{5}} (\Delta \tilde{P}_C)^{-\frac{1}{5}}.$$

Полученные закономерности для I области гомогенной фазы  $\beta - SiC$  могут быть записаны в обобщенном виде:

$$p = K (\Delta \tilde{P}_C)^{\frac{1}{5}}, \quad (9)$$

$$X_{C_i^{4-}} = K (\Delta \tilde{P}_C)^{\frac{1}{5}}, \quad (10)$$

$$n = K (\Delta \tilde{P}_C)^{-\frac{1}{5}}, \quad (11)$$

$$X_{V_C^{4+}} = K (\Delta \tilde{P}_C)^{-\frac{1}{5}}, \quad (12)$$

$$X_{V_{Si}^{4-}} = K (\Delta \tilde{P}_C)^{\frac{1}{5}}, \quad (25)$$

$$X_{Si_i^{4+}} = K (\Delta \tilde{P}_C)^{-\frac{1}{5}}, \quad (13)$$

где  $K$  — обобщенная константа равновесия квазихимических процессов, которая позднее будет детально рассмотрена.

Дефекты по модели Френкеля в сочетании с ростовыми дефектами имеют свои особенности в III области гомогенной фазы  $\beta - SiC$ .

Третье фазовое поле гомогенной области  $\beta - SiC$  граничит с фазой кремния, поэтому, рассматривая процесс теплового разупорядочения по Френкелю, внесем коррективы в выражения (18), (19). Вероятность процесса образования междоузельного атома углерода по сравнению с образованием междоузельного атома кремния мала, кроме того, и концентрация вакансий на месте атомов углерода высока, и можно записать

$$O \rightleftharpoons V_{Si}^{4-} + Si_i^{4+}, \quad (14)$$

где  $O$  — обозначение совершенной структуры фазы  $\beta - SiC$  при температуре абсолютного нуля;  $Si_i^{4+}$  — положительно ионизованный атом кремния в междоузлии;  $V_{Si}^{4-}$  — отрицательно заряженная вакансия на месте атома кремния в фазе  $\beta - SiC$ .

Константа равновесия образования дефекта по Френкелю в III области

$$K''_{fp} = X_{Si^{4+}} X_{V_{Si}^{4-}}. \quad (15)$$

Уравнение электронейтральности для теплового дефекта по Френкелю в III области:

$$4X_{V_{Si}^{4-}} + n = 4X_{V_{Si}^{4+}} + p. \quad (16)$$

Характерной особенностью III области фазы  $\beta$ -SiC является ее граница с фазой монокристаллического кремния, поэтому вероятность образования вакансии в подрешетке кремния  $\beta$ -SiC фазы незначительна, а концентрация междоузельных атомов кремния в  $\beta$ -SiC фазе достаточно велика при температуре процесса ее роста.

Выражение электронейтральности (83) в таком случае упрощается и записывается следующим образом:

$$4X_{Si^{4+}} = n. \quad (17)$$

Закономерность изменения электронов и междоузельных атомов кремния в III области фазы  $\beta$ -SiC можно найти, решая совместно выражение (4), его уравнение электронейтральности (36) и (84):

$$n = 4^{\frac{1}{5}} (K_{V^{4+}})^{\frac{1}{5}} (K_P)^{\frac{1}{5}} (\Delta\tilde{P}_C)^{-\frac{1}{5}}, \quad (18)$$

$$X_{Si^{4+}} = 4^{-\frac{4}{5}} (K_{V^{4+}})^{\frac{1}{5}} (K_P)^{\frac{1}{5}} (\Delta\tilde{P}_C)^{-\frac{1}{5}}, \quad (19)$$

$$X_{V_C^{4+}} = 4^{-\frac{4}{5}} (K_{V^{4+}})^{\frac{1}{5}} (K_P)^{\frac{1}{5}} (\Delta\tilde{P}_C)^{-\frac{1}{5}}. \quad (38)$$

Концентрацию вакансий на месте атомов кремния в III фазовом поле можно определить из выражений (81) и (86)

$$X_{V_{Si}^{4-}} = 4^{\frac{4}{5}} (K''_{fp}) (K_{V^{4+}})^{-\frac{1}{5}} (K_P)^{-\frac{1}{5}} (\Delta\tilde{P}_C)^{\frac{1}{5}}. \quad (20)$$

Совместное решение уравнений (17) и (85) приводит к нахождению закономерности изменения концентрации дырок в III фазовом поле гомогенной фазы  $\beta$ -SiC

$$p = 4^{-\frac{1}{5}} K_i (K_{V^{4+}})^{-\frac{1}{5}} (K_P)^{-\frac{1}{5}} (\Delta\tilde{P}_C)^{\frac{1}{5}}. \quad (21)$$

Концентрацию междоузельных атомов углерода находим из (70)

$$X_{C_i^{4-}} = \frac{p}{4} = 4^{-\frac{6}{5}} K_i (K_{V^{4+}})^{-\frac{1}{5}} (K_P)^{-\frac{1}{5}} (\Delta\tilde{P}_C)^{\frac{1}{5}}. \quad (22)$$

Полученные закономерности изменения концентрации дефектов в III области гомогенной фазы  $\beta$ -SiC можно записать в обобщенном виде:

$$X_{V_C^{4+}} = X_{Si^{4+}} = K (\Delta\tilde{P}_C)^{-\frac{1}{5}}, \quad (23)$$

$$n = K (\Delta\tilde{P}_C)^{-\frac{1}{5}},$$

$$X_{V_{Si}^{4-}} = K (\Delta\tilde{P}_C)^{\frac{1}{5}}, \quad (24)$$

$$p = K (\Delta\tilde{P}_C)^{\frac{1}{5}}, \quad (25)$$

$$X_{C_i^{4-}} = K (\Delta\tilde{P}_C)^{\frac{1}{5}}. \quad (26)$$

Закономерное изменение концентрации ростовых и тепловых дефектов по Френкелю для второй, достаточно узкой, гомогенной фазы  $\beta$ -SiC можно определить с учетом закономерного изменения концентрации ростовых дефектов согласно выражению (7).

Уравнение электронейтральности для френкелевского беспорядка во II фазовом поле гомогенной области для процесса (18)

$$X_{V_c^{4+}} + X_{S_i^{4+}} = X_{C_i^{4-}} + X_{V_{Si}^{4-}}, \quad (27)$$

$$p = n. \quad (28)$$

В том случае, когда превалирует механизм теплового дефектообразования по Френкелю над механизмом межзонных переходов в собственном полупроводнике, т.е.  $K_{\phi p}^* > K_i$ , где  $K_{\phi p}^*$  — константа равновесия во второй области гомогенной фазы  $\beta - SiC$ , применяют условие (94) и концентрацию дефектов определяют из преобразованного выражения (19), для которого:

$$K_{\phi p} = X_{V_c^{4+}} X_{V_{Si}^{4-}} X_{C_i^{4-}} X_{S_i^{4+}}, \quad (29)$$

$$X_{S_i^{4+}} = X_{V_{Si}^{4-}} = X_{V_c^{4+}} = X_{C_i^{4-}} = K_{\phi p}^{\frac{1}{4}}. \quad (30)$$

Концентрацию дырок во второй области определяют, решая уравнения (2) и (97), таким образом:

$$p = (K_{V_{Si}^{4-}})^{\frac{1}{4}} (K_{\phi p}^*)^{-\frac{1}{8}} (\Delta \tilde{P}_C)^{\frac{1}{4}}. \quad (31)$$

Концентрацию электронов во второй области гомогенной фазы в зависимости от пересыщения можно найти с учетом выражений (17) и (98) в следующем виде:

$$n = K_i (K_{V_{Si}^{4+}})^{-\frac{1}{4}} (K_{\phi p}^*)^{\frac{1}{8}} (\Delta \tilde{P}_C)^{-\frac{1}{4}}. \quad (32)$$

Таким образом, в обобщенном виде для II области гомогенности фазового поля концентрацию заряженных дефектов, тепловых и ростовых, по Френкелю в обобщенном виде можно записать для условия  $K_{\phi p} > K_i$  в таком виде:

$$X_{S_i^{4+}} = X_{V_{Si}^{4-}} = X_{V_c^{4+}} = X_{C_i^{4-}} = K, \quad (33)$$

$$p = K (\Delta \tilde{P}_C)^{\frac{1}{4}}, \quad (34)$$

$$n = K (\Delta \tilde{P}_C)^{-\frac{1}{4}}. \quad (35)$$

Для случая, в котором выполняется условие  $K_{\phi p} < K_i$ , концентрация заряженных вакансий в подрешетке кремния определяется из решения уравнений (2) и (48)

$$X_{V_{Si}^{4-}} = (K_{V_{Si}^{4-}}) K_i^{-2} (\Delta \tilde{P}_C). \quad (36)$$

Концентрацию междоузельных атомов кремния в подрешетке кремния во II фазовом поле определяют из выражения

$$O \rightleftharpoons V_{Si}^{4-} + S_i^{4+},$$

и его константа равновесия

$$K_{\phi p} = X_{S_i^{4+}} X_{V_{Si}^{4-}}.$$

$$X_{S_i^{4+}} = K_{\phi p} (K_{S_i^{4+}})^{-1} K_i^2 (\Delta \tilde{P}_C)^{-1}. \quad (37)$$

Концентрацию заряженных вакансий в подрешетке углерода во втором фазовом поле гомогенной фазы  $\beta - SiC$  определяют решением уравнений (4), (36) и (48)

$$X_{V_c^{4+}} = (K_{V_c^{4+}}) K_p K_i^2 (\Delta \tilde{P}_C)^{-1}. \quad (38)$$

Концентрация междоузельных атомов в подрешетке углерода может быть определена из выражений теплового разупорядочения по Френкелю:

$$O \rightleftharpoons V_C^{4+} + C_i^{4-},$$

и его константы равновесия

$$K_{\phi p} = X_{V_C^{4+}} X_{C_i^{4-}},$$

$$X_{C_i^{4-}} = K_{\phi p} (K_{V_C^{4+}})^{-1} K_P^{-1} K_i^{-2} (\Delta \tilde{P}_C). \quad (39)$$

В обобщенном виде концентрацию ростовых и тепловых дефектов по Френкелю для второго фазового поля гомогенной области  $\beta$ -SiC для условия  $K_i > K_{\phi p}$  можно представить в виде:

$$n = p = K, \quad (40)$$

$$X_{V_{Si}^{4-}} = K (\Delta \tilde{P}_C)^1, \quad (41)$$

$$X_{V_C^{4+}} = K (\Delta \tilde{P}_C)^{-1}, \quad (42)$$

$$X_{C_i^{4-}} = K (\Delta \tilde{P}_C)^1, \quad (43)$$

$$X_{Si_i^{4+}} = K (\Delta \tilde{P}_C)^{-1}. \quad (44)$$

Построим зависимость профилей распределения ростовых дефектов и дефектов по Френкелю в гомогенной области  $\beta$ -SiC в зависимости от пересыщения по углероду со стороны газовой фазы. Построение целесообразно начать со второй области гомогенной фазы  $\beta$ -SiC, исходя из изотермических зависимостей концентрации дефектов, представленных в логарифмических координатах:

$$\ln X = \ln K \pm \frac{1}{n} \ln (\Delta \tilde{P}_C). \quad (45)$$

Концентрационный уровень заряженных дефектов для случая, когда  $K_{\phi p}^* > K_i$ , во второй области гомогенной фазы  $\beta$ -SiC характеризуется выражением (100), в котором их концентрация не зависит от пересыщения газовой фазы по атомам углерода в газовой фазе. На рис. 3 это можно отобразить отрезком  $ba$ .

Точки  $b$  и  $a$  определяют границы условия электронейтральности по уравнению (94), эти границы достаточно узкие, и в пределе точки  $b$  и  $a$  совпадают. Справа от точки  $a$  применено условие электронейтральности (24), слева от точки  $b$  — (31). В гомогенной фазе  $\beta$ -SiC со стороны газовой фазы (область I) зависимость концентрации дефектов  $X_{V_{Si}^{4-}}$  описывается выражением (25). Точка  $a$  является общей для I и II областей гомогенной фазы  $\beta$ -SiC, при нанесении на график прямых (100) и (25) в координатах  $\ln X - \ln (\Delta \tilde{P}_C)$  они в точке  $a$  пересекутся. В точке  $b$  пересекутся прямые (100) и (91).

Поскольку угол наклона прямых (25) и (90) известен, составляет  $1/5$ , то этой информации достаточно для того, чтобы нанести точки  $a$  и  $b$  на график, а концентрационные зависимости отобразятся линиями соответственно  $al$  и  $bd$ . В соответствии с выражением (25) другим видом дефекта являются дырки, и в первой области гомогенной фазы их концентрация равна концентрации  $X_{V_{Si}^{4-}}$ , т.е. прямые совпадают.

При переходе во II область концентрация дырок меняется в соответствии с выражением (101) для случая  $K_{\phi p}^* > K_i$ , это прямая  $ac$ . Закономерное изменение концентрации дырок в III области меняется в соответствии с выражением (92) — это прямая  $cg$ .

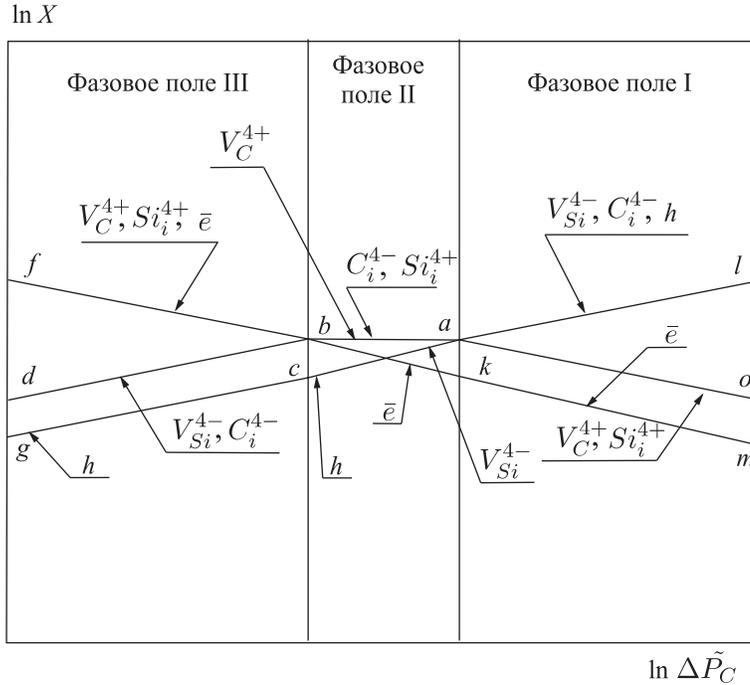


Рис. 3. Зависимость концентрации равновесных ростовых и тепловых четырехкратно ионизированных дефектов по Френкелю в гомогенной области  $\beta$ -SiC от пересыщения по атомам углерода в газовой фазе над  $\beta$ -SiC ( $K_{\text{фр}}^* > K_i$ )

Концентрация вакансий в подрешетке углерода гомогенной фазы  $\beta$ -SiC в первой области меняется в соответствии с уравнением (79) и изображается прямой  $ao$ . В третьей области гомогенной фазы  $\beta$ -SiC в соответствии с уравнением (90) концентрация изображается прямой  $fb$ , во второй области для случая  $K_{\text{фр}}^* > K_i$  концентрация вакансий в подрешетке углерода — прямая  $ab$ , в соответствии с выражением (100). Концентрация электронов, в соответствии с выражением (102) изображается отрезком прямой  $bk$ , которая в I области имеет закономерность (78) и изображается прямой  $km$ .

Закономерность изменения концентрации междуузельных атомов углерода в I области гомогенной фазы  $\beta$ -SiC отображается отрезком  $al$ , который соответствует выражению (77). Во второй области для случая  $K_{\text{фр}}^* > K_i$  концентрация междуузельных атомов углерода не зависит от пересыщения по атомам углерода в газовой фазе, как следует из выражения (97), и соответствует участку прямой  $ab$ . При переходе в III область закономерность (93) отвечает отрезку прямой  $bd$ .

Изменение концентрации междуузельных атомов кремния в I, II и III областях гомогенной фазы  $\beta$ -SiC отвечает соответственно отрезкам прямых  $ao$ ,  $ab$ ,  $bf$ .

Полученные закономерности точечного дефектообразования оказывают существенное влияние на механизмы переноса в гомогенной фазе  $\beta$ -SiC и, кроме того, определяют их основные кинетические характеристики. В исследуемом процессе массоперенос связан с нарушением стехиометрии в области гомогенности  $\beta$ -SiC, а эти нарушения, в свою очередь, определяют характер диффузии.

Как видно из рис. 2 и рис. 3 в гомогенной фазе точечные дефекты представляют собой заряженные частицы, и поэтому движущей силой процессов переноса

являются разность химических потенциалов и силы электрического поля, т.е. в данном случае мы имеем дело с электрохимическим переносом.

Если рассмотреть влияние точечных дефектов и характер их распределения в гомогенной фазе  $\beta$ -SiC на механизмы диффузии атомов ответственных за образование этой фазы, то можно сказать, что в пленке могут быть реализованы все три механизма массопереноса. Однако, доминирующее влияние оказывает тот, который оказывается термодинамически наиболее выгодным.

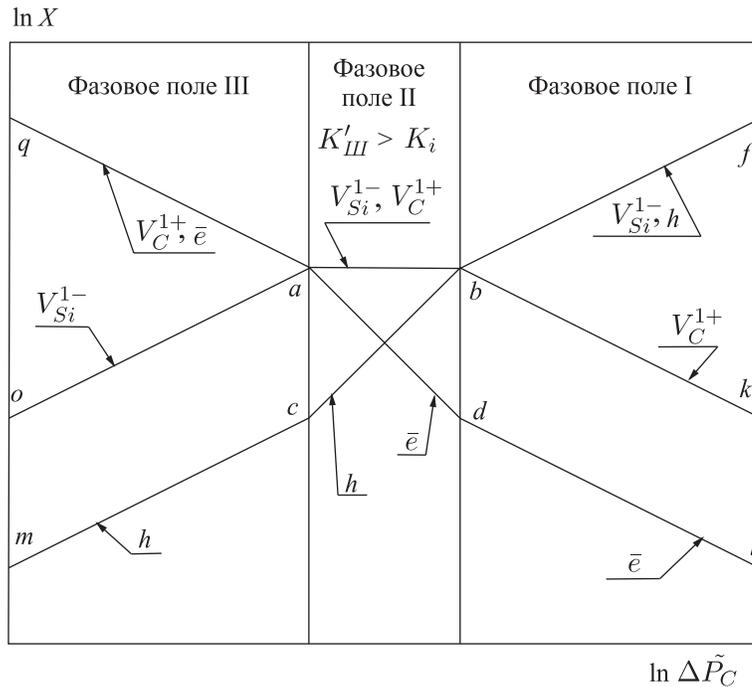


Рис. 4. Зависимость концентрации однократно ионизированных равновесных дефектов ростовых и тепловых по Шоттки в гомогенной области  $\beta$ -SiC от пересыщения по атомарному углероду в газовой фазе над  $\beta$ -SiC

В области гомогенной фазы  $\beta$ -SiC, граничащей с кремниевой подложкой с одной стороны и газовой фазой, обогащенной углеводородами с другой стороны, при температуре выращивания структуры вероятны процессы точечного дефектообразования тепловой и ростовой природы с иной степенью ионизации, например с однократной.

Руководствуясь вышеприведенной методикой расчета распределения заряженных точечных дефектов в гомогенной фазе  $\beta$ -SiC, выполнен расчет системы и в предположении однократной ионизации точечных дефектов. Результаты расчета представлены на рис. 4 и рис. 5 в координатах "состав-свойство".

## Заключение

В работе проанализировано и представлено распределение точечных дефектов теплового и ростового типа в зависимости от пересыщения по углероду в газовой фазе над полупроводниковой подложкой в системе Si-C-H, а также проанализи-

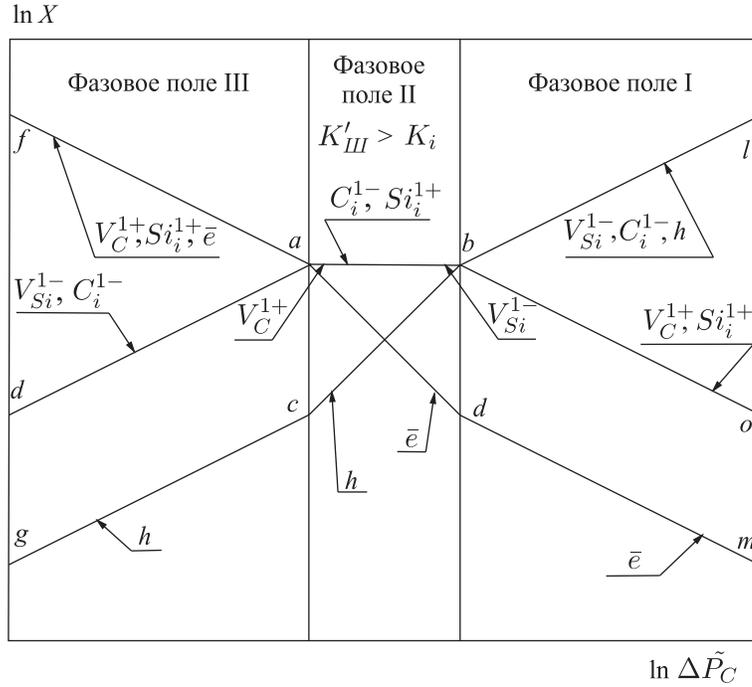


Рис. 5. Зависимость концентрации однократно ионизированных равновесных дефектов ростовых и тепловых по Френкелю в гомогенной области  $\beta - SiC$  от пересыщения по атомам углерода в газовой фазе над  $\beta - SiC$  ( $K'_{III} > K_i$ )

рованы два граничных условия, а именно, четырехкратной и однократной ионизации точечных дефектов тепловой и ростовой природы в гомогенной фазе при температуре гетероэндотаксии структур  $\beta - SiC/Si$ . Распределение заряженных точечных дефектов определено в рамках моделей тепловой дефект по Шоттки плюс ростовой дефект и тепловой дефект по Френкелю плюс ростовой дефект.

Результаты анализа точечного дефектообразования позволяют прогнозировать условия образования пересыщения и образование дополнительных донорных и акцепторных уровней в запрещенной зоне, вследствие нестехиометрии  $SiC$ , например при резком снижении температуры подложки при завершении роста пленки.

Распределение заряженных точечных дефектов при температуре роста влияет на механизм диффузии атомов углерода, кремния и легирующей примеси в твердофазных процессах гетероэндотаксии  $\beta - SiC/Si$ , а также определяет кинетические закономерности в системе  $Si - C - H$ .

Использование результатов теоретического анализа точечного дефектообразования в гомогенной фазе  $\beta - SiC$  при температуре выращивания пленки для случаев однократной и четырехкратной степени ионизации возможно при моделировании физического механизма диффузионных процессов гетероэндотаксии (процессов диффузии атомов углерода, кремния и легирующей примеси при выращивании гетероструктуры) полупроводникового карбида кремния на кремниевой подложке.

## Литература

- [1] Отблеск, А.Е. Теоретические основы разработки силовых приборов на карбиде кремния / А.Е. Отблеск, В.Е. Челноков // Материалы IX зимней школы по физике полупроводников. – Ленинград, – 1979. – С. 161–193.
- [2] Motohiro, I. Silicon carbide: fundamentals / I. Motohiro // Nuclear Instrumentals and Methods in Physics Research. – 2001. – А. 466. – Р. 406–411.
- [3] Иванов, П.А. Мощные биполярные приборы на основе карбида кремния / П.А. Иванов [и др.] // Физика и техника полупроводников. – 2005. – Т. 39. – Вып. 8. – С. 897–913.
- [4] Третьяков Ю.Д. Твердофазные реакции / Ю.Д. Третьяков. – М.: Химия, 1978. – 358 с.
- [5] Чеботин, В.Н. Физическая химия твердого тела / В.Н. Чеботин. – М.: Химия, 1982. – 319 с.
- [6] Ковтуненко, В.П. Физическая химия твердого тела / В.П. Ковтуненко. – М.: Высшая школа, 1993. – 352 с.

Поступила в редакцию — 22/XI/2006;  
в окончательном варианте — 22/XI/2006.

## ANALYSIS OF POINT DEFECT FORMATION IN HOMOGENEOUS $SiC$ PHASE DURING HETEROSTRUCTURE $SiC/Si$ ENDOTAXY PROCESS

© 2003 V.I. Tchepurnov<sup>2</sup> K.P. Sivakova

Heteroepitaxy supported silicon carbide films as a perspective material for high-temperature electronics is considered. In the paper the point defect formation in homogeneous  $\beta-SiC$  phase based on silicon matrix and gas phase hydrocarbons at 1360–1380°C temperature range and under safe pressure is analyzed.

Paper received 22/XI/2006.

Paper accepted 22/XI/2006.

---

<sup>2</sup>Tchepurnov Viktor Ivanovich, Sivakova Ksenia Petrovna (sivakovakp@mail.ru), Dept. of Solid State Electronics, Samara State University, Samara, 443011, Russia.