

УДК 621.315

Обзор

**Основные дефекты в слитках
и эпитаксиальных слоях карбида кремния
II. Микропоры. Малоугловые границы. Дефекты упаковки**

Д.Д.Авров¹, А.О.Лебедев^{1,2}, Ю.М.Таиров¹

¹*Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет
«ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)*

²*Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе РАН (г. Санкт-Петербург)*

Review

**Main Defects in Ingots and Epitaxial Layers of Silicon Carbide
II. Micropipes. Low-Angle Boundaries. Stacking Faults**

D.D. Avrov¹, A.O. Lebedev^{1,2}, Yu.M. Tairov¹

¹*Saint Petersburg State Electrotechnical University ETU-LETI, St. Petersburg*

²*Ioffe Institute, Russian Academy of Sciences, St. Petersburg*

Приведены сведения о дефектах, существующих в слитках и эпитаксиальных слоях карбида кремния. Рассмотрены микропоры, малоугловые границы и дефекты упаковки.

Ключевые слова: карбид кремния; микропоры; малоугловые границы; дефекты упаковки.

The data on the defects, existing in ingots and epitaxial silicon carbide, have been presented. The micropipes, the low-angle boundaries and the stacking faults have been considered.

Keywords: silicon carbide; micropipes; low angle boundaries; stacking faults.

Введение. Продолжен обзор дефектов, существующих в слитках и эпитаксиальных пленках карбида кремния и препятствующих созданию приборов силовой и СВЧ-электроники, начатый в работе [1], где рассмотрена дислокационная структура слитков и эпитаксиальных слоев карбида кремния, а также выявлены их морфологические дефекты.

Микропоры. Наиболее серьезным дефектом, приводящим к фатальным последствиям при работе силовых приборов на основе карбида кремния SiC, всегда считались микропоры – протяженные дефекты, вытянутые вдоль направления [0001], с полостью ядра. Микропоры уменьшают пробивные напряжения в $p-i-n$ -диодах и диодах Шоттки, а также увеличивают токи утечки в приборных структурах на основе карбида кремния. Эти дефекты не уникальны для карбида кремния: они наблюдаются в большом количестве материалов (CdI₂, PbI₂, ZnS, GaN и др.) [2]. Известно, что микропоры возникают в дефектных областях кристалла. В частности, применительно к карбиду кремния их возникновение связывают с включениями второй фазы – каплями жидкого кремния или микрочастицами углерода, наличием посторонних примесей, например металлов, дефектами упаковки слоев, границами политипных включений, характерными пустотами [3]. Образование и огранение полых каналов, параллельных направлению роста слитка, можно объяснить эффектом вторичного испарения материала затравки [4], в частности, при недостаточно плотном креплении его к подложкодержателю [5].

Обычно микропору отождествляют с супервинтовой дислокацией с вектором Бюргерса, в несколько раз превышающем размер элементарной ячейки карбида кремния в направлении [0001]. В соответствии с классическими представлениями, развитыми в [3], винтовые дислокации, в том числе с полым ядром, образуются в процессе зарастания включений второй фазы в растущем кристалле. При этом винтовые дислокации зарождаются парами с противоположными векторами Бюргерса или группой с суммарным вектором Бюргерса, равным нулю [3].

Согласно модели Франка [6], в изотропном теле дислокация с вектором Бюргерса, превышающим некоторое критическое значение, имеет полую область ядра радиусом r , не заполненную материалом [7]. Равновесная величина r определяется из равенства изменений поверхностной и упругой энергий, соответствующих возникновению полого ядра [7]:

$$r = (\mu b^2) / (8\pi^2 \gamma),$$

где μ – модуль сдвига; b – вектор Бюргерса дислокации; γ – поверхностная энергия кристалла.

В [5] также выведено простое соотношение, которому должна удовлетворять величина вектора Бюргерса, для того чтобы ядро дислокации было полым:

$$b_{\min} > 40\pi\gamma / \mu.$$

Величины r и $b_{\min}$ зависят от свойств среды, т.е. соотношения μ/γ . В свою очередь, это соотношение может быть оценено из экспериментальных данных зависимостей диаметра микропор от квадрата вектора Бюргерса и характеризуется достаточно большим разбросом значений (табл.1 [8]).

Кроме того, радиус полого ядра зависит от степени пересыщения в процессе роста [17] и должен уменьшаться при удалении от точки выхода микропоры на поверхность [18]. При выявлении микропор методом селективного травления в расплаве KOH происходит значительный растрав трубки микропоры на Si-границы кристалла, тогда как наблюдаемый размер дефекта на C-границы примерно соответствует действительному размеру микропоры [4].

Характерные параметры микропор варьируются в чрезвычайно широких пределах. Так, радиус полого ядра микропор может составлять от десятков нанометров до десятков микрометров, что позволяет некоторым авторам подразделять микропоры на собственно микропоры и нанопоры или макро- и микропоры. В работе [19] отмечается, что

Таблица 1

Экспериментальные значения μ/γ

$(\mu / \gamma), \times 10^{-12} \text{ м}$	Метод определения		Литературный источник
	вектора Бюргерса	диаметра микропоры	
25–127	Многолучевая интерферометрия	Оптическая микроскопия	[9]
3,3		Фазоконтрастная микроскопия	[10]
10–170	Двухлучевая интерферометрия	Сканирующая электронная микроскопия	[11]
20	Термодинамический расчет		[12]
2,4	Двухлучевая интерферометрия	Рентгеновская топография	[13]
20	Атомно-силовая микроскопия		[14]
1,1–1,6	Рентгеновская топография	Сканирующая электронная микроскопия	[15]
4,9	Атомно-силовая микроскопия		[16]

термодинамически равновесный диаметр полого ядра дислокации существенно меньше наблюдаемого диаметра микропоры. Таким образом, полое ядро дислокации должно рассматриваться только как зародыш микропоры, в то время как развитие последней может быть обусловлено термическим травлением или капиллярными эффектами [19].

В научной литературе имеются существенные расхождения по вопросу о минимальном значении вектора Бюргерса дислокации с полым ядром. Так, например, в [8] отмечается, что винтовые дислокации в политипе 6H-SiC не имеют полого ядра, если вектор Бюргерса удовлетворяет условию $b < 3c$, где c – параметр решетки политипа 6H-SiC в направлении [0001], а для политипа 4H полое ядро отсутствует, только если $b < 4c$. В то же время, например, в [20] зафиксировано в политипе 6H-SiC наличие винтовых дислокаций с заполненной областью ядра с вектором Бюргерса $b = 14c$ (!), а в [21] описана микропора с вектором Бюргерса $667c$. Столь высокая вариативность параметров микропор, по всей видимости, связана с тем фактом, что в формировании микропор задействовано большое количество факторов различной природы [4].

Механизмы возникновения микропор. Винтовой характер микропоры доказан с использованием рентгенотопографических исследований. Кроме того, выходы микропор на поверхность часто наблюдаются в центре спиралей роста. Тем не менее до сих пор в научной литературе существуют противоположные точки зрения о дислокационном характере микропор и взаимном соответствии вектора Бюргерса и диаметра полого ядра. В частности, существование и устойчивость дислокаций с большим вектором Бюргерса не вполне понятна. Супердислокация с большим вектором Бюргерса $B = nb$, где n – натуральное число, b – вектор минимальной трансляции, энергетически невыгодна и должна диссоциировать на n элементарных дислокаций согласно известному b^2 -критерию [7]:

$$B^2 = (nb)^2 > nb^2.$$

Для объяснения возникновения и устойчивости микропор предложен ряд механизмов. В частности, в работе [22] представлен механизм, согласно которому дислокационное образование с полым ядром формируется при срастании трех ростовых доменов на поверхности роста [0001]. Три малоугловые границы кручения, соответствующие

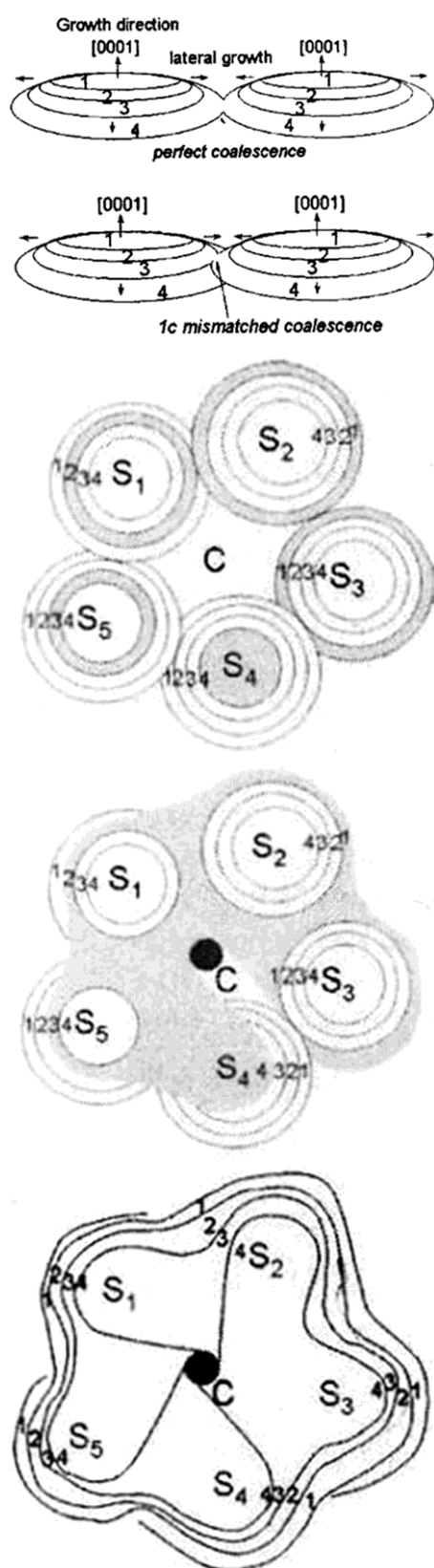


Рис.1. Механизм коалесценции со смещением [20]

попарным границам доменов, в общей точке образуют протяженный дефект с утроенным вектором Бюргерса, который согласно критерию Франка должен иметь полое ядро.

Альтернативный подход предложен в [23]. Возникновение микропоры рассматривается как процесс, происходящий в результате появления на растущей поверхности капель кремния. Дальнейший рост кристалла приводит к появлению дефекта с полым ядром. Дислокационный характер дефект приобретает в результате взаимодействия с близлежащими винтовыми дислокациями, образовавшимися независимо от этого дефекта.

В работе [24] структура микропор исследована на основе комбинированной методики с использованием оптической микроскопии в поляризованном свете и атомно-силовой микроскопии. Установлено, что вектор Бюргерса микропор для обоих промышленных полиморфов карбида составляет в среднем $\sim 100 \text{ \AA}$, что противоречит, в частности, данным [4]. Меньшие значения векторов Бюргерса соответствуют обычным винтовым дислокациям. Для объяснения возникновения микропор в [24] рассмотрен механизм смещенной коалесценции, т.е. возникновение центрального дефекта при срастании большого числа центров зарождения, смещенных друг относительно друга трансляциями, кратными периоду решетки в направлении $[0001]$ (рис.1).

При снижении скорости роста слитка плотность микропор имеет тенденцию к уменьшению. Высококачественные слитки практически без микропор могут быть выращены сублимационным методом на высококачественных подложках при крайне низких скоростях роста в квазиравновесных условиях.

Заполнение микропор. При эпитаксиальном росте слоев карбида кремния наблюдается эффект заполнения (filling) или закрывания (closing) микропор, существующих в исходной пластине. Микропора закрывается, если скорость движения ступени выше скорости спирального роста вокруг микропоры. Это приводит к изгибу микропоры и ее последующей диссоциации на элементарные дислокации. Низкие значения C/Si в объеме газовой фазы

приводят к подавлению спирального роста и способствуют закрытию микропор. Закрытие микропоры сопровождается появлением на поверхности роста морфологического дефекта – протяженной канавки (trench), вытянутой вдоль направления движения ступеней роста, и возникновением дефектов упаковки в плоскостях (0001) и ($1\bar{1}00$).

Заполнение микропор при эпитаксиальном росте на on-cut затравках практически не зависит от ростовых условий, тогда как на off-cut подложках с 8° отклонением наблюдается усиление эффекта при уменьшении давления в камере и увеличении скорости роста. Заполнение микропор на C-границ подложки протекает интенсивнее, чем на Si-границ. В целом влияние основных технологических параметров процесса эпитаксиального роста (ориентация и полярность грани затравки, отношение C/Si в газовой фазе, общее давление и скорость роста слоя) на процесс заполнения микропор может быть интерпретировано в рамках представлений о свободной поверхностной энергии.

За последние годы достигнут существенный прогресс в уменьшении плотности микропор. В 2004 г. впервые продемонстрирована 2-дюймовая пластина, свободная от микропор, полученная RAF-методом. В настоящее время сотрудниками компании Cree Inc., USA запатентован метод выращивания беспористых слитков карбида кремния на (0001)-затравках. Метод, среди прочего, включает ноу-хау, связанные с установкой затравки на затравкодержателе и созданием однородного термического контакта между ними, и позволяет исключить все процессы, индуцирующие возникновение микропор.

Малоугловые доменные границы. Одна из хорошо известных особенностей слитков карбида кремния, выращенных сублимационным методом, – их доменное строение. Предполагается [25], что возникновение доменов в карбиде кремния связано с винтовым дислокационным механизмом роста при наличии множества независимых центров зарождения. Размеры доменов на поверхности роста ориентировочно составляют величину 1 мкм^2 .

Согласно механизму, представленному в [26], при активации вторичной системы скольжения $1/3 \langle 11\bar{2}0 \rangle \{1\bar{1}00\}$ происходит пространственное перераспределение прорастающих дислокаций с краевой компонентой вектора Бюргерса: при выстраивании их в доменные стенки, ориентированные вдоль $\langle 1\bar{1}00 \rangle$, общая энергия кристалла уменьшается. Вектор Бюргерса каждой индивидуальной дислокации в таких последовательностях перпендикулярен направлению цепочки.

В начальный момент роста распределение малоугловых границ в растущем слитке полностью идентично затравочному кристаллу. В процессе роста слитка может происходить появление, оформление или перемещение границ доменов, что определяется напряженным состоянием слитка, в частности величиной латеральных температурных градиентов в ростовой системе [27]. Миграция индивидуальных дислокаций к зеренной границе приводит к тому, что в процессе роста слитка плотность дислокаций в каждом отдельно взятом зерне значительно снижается, плотность зернограницных дислокаций пропорционально возрастает [28]. При определенных условиях малоугловые границы могут являться эффективными концентраторами напряжений, увеличивая вероятность разрушения пластины в процессе последующего эпитаксиального роста [4].

Тип доменных малоугловых границ (граница наклона – двух видов, граница кручения) определяется рентгеновским дифрактометрическим методом по методике, апробированной в [26, 29] (рис.2).

Границы доменов, ориентированные по направлениям $\langle 10\bar{1}0 \rangle$, обычно представляют собой малоугловые наклонные границы: разориентации соседних доменов связаны с малыми поворотами или вокруг оси [0001] (так называемая граница наклона

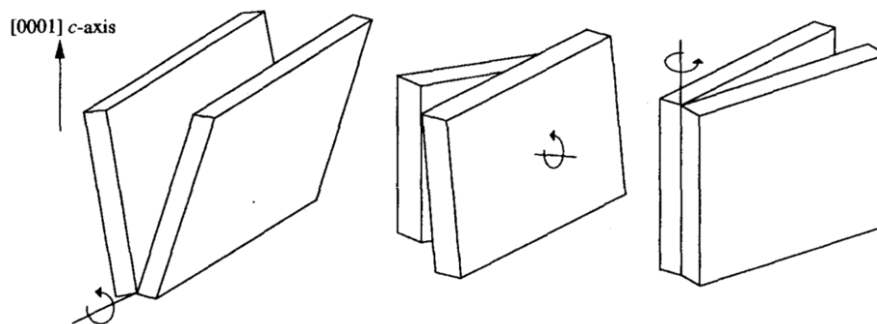


Рис.2. Типы малоугловых доменных границ (две границы наклона и граница кручения) [29]

призматических плоскостей), или вокруг осей $\langle 10\bar{1}0 \rangle$ (граница наклона базисных плоскостей) [29] и приводят к значительному уширению рентгеновских кривых дифракционного отражения образца. Для интерпретации доменной структуры, соответствующей границе наклона базисных плоскостей, авторы [29] постулировали отклонение прорастающих дислокаций от направления $[0001]$, что может вызывать появление малого поворота вокруг направления $\langle 10\bar{1}0 \rangle$. Появление наклона базисных плоскостей и границ смешанного типа может быть объяснено взаимодействием «коллектива» скользящих базисных дислокаций с уже существующей в кристалле наклонной границей.

Известно, что малоугловые границы, сформированные в сильно напряженных кристаллах, могут иметь две или даже три поворотные компоненты [27]. Так, в [30] диагностированы более сложные доменные границы, вызванные поворотами вокруг осей $\langle 10\bar{1}0 \rangle$ и $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ одновременно (так называемые смешанные границы кручения – наклона базисных плоскостей). В то же время рост на высококачественных затравках при низком уровне напряжений в слитке позволяет подавить процессы образования новых доменных границ [30].

В качестве альтернативных причин возникновения малоугловых границ в кристаллах карбида кремния называются микропоры и политипные включения, а также любые включения [29].

Дефекты упаковки. Любое нарушение порядка чередования плотноупакованных слоев, характерного для данной структуры, называют дефектом упаковки. Такой дефект можно создать сдвигом плотноупакованной плоскости, внедрением или удалением дополнительной плоскости.

Здесь и далее рассматривается в основном политип 4Н карбида кремния, для политипов 6Н и 3С изложение аналогично.

Дефекты упаковки могут появиться в объемном кристалле или в эпитаксиальном слое в процессе высокотемпературного роста (так называемые ростовые дефекты упаковки), в результате постростовой обработки (отжига, окисления) или при механическом воздействии. Кроме того, дефекты упаковки могут индуцироваться облучением лазером, электронным пучком или возникать при работе электронного прибора.

Ростовые дефекты упаковки. Ростовые дефекты, возникающие в эпитаксиальных слоях и кристаллах карбида кремния, обычно интерпретируются методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения, а в дальнейшем – оптически-ми методами. Основные типы ростовых дефектов упаковки представлены в табл.2.

Таблица 2

Ростовые дефекты упаковки в эпитаксиальных слоях
и кристаллах карбида кремния

Характеристики системы и метода роста	Дефект	Описание дефекта	Метод обнаружения	Литературный источник
Сублимационный рост 6H-SiC на (1100)	(4,3)	Внешний по Франку	HRTEM	[31]
4H-SiC, эпитаксия, 8°-подложка, $5 \cdot 10^{18}/1,5 \cdot 10^{15}$, SiH ₄ -C ₃ H ₈ -H ₂ , 1650 °C	(5,2)	Внутренний по Франку	ФЛ при $T_{\text{комн}}$, пик 420 нм	[32]
	(6,2)	Двойной по Шокли	HRTEM ФЛ, пик 500 нм	[32, 33]
	(4,4)	Мотив поли-типа 8H	HRTEM ФЛ, пик 455 нм	
	(3,5)	Мотив поли-типа 24R	HRTEM ФЛ, пик 480	[33]
4H-SiC, эпитаксия, $7 \cdot 10^{15}$, n-тип, SiH ₂ Cl ₂ -C ₃ H ₈ -H ₂ , 1500 °C	(4,4)	Мотив поли-типа 8H	КЛ при $T_{\text{комн}}$, пик 461 нм	[34]
	(6,2)	Двойной по Шокли	КЛ при $T_{\text{комн}}$, пик 500 нм	
	Не идентифицирован	–	КЛ при $T_{\text{комн}}$, пик 481 нм	
4H-SiC, эпитаксия, 8°-подложка, 1550 °C	(4,4)	Мотив поли-типа 8H	HRTEM ФЛ при 100 К, пик 467 нм	[35]
4H-SiC, эпитаксия, 8°-подложка, H ₂ +SiH ₄ +C ₃ H ₈	(5,2)	Внутренний по Франку	HRTEM, grazing incidence synchrotron reflexion X-ray topography	[36]
4H-SiC, эпитаксия, 8°-подложка, SiH ₄ -C ₃ H ₈ -H ₂ , 1835 °C	(4,4)	Мотив поли-типа 8H	HRTEM ФЛ, КЛ, пик 465 нм	[37]
4H-SiC, эпитаксия, 8°-подложка, C ₇ H ₂₀ Si ₂ -TMA, 1370 °C	(6,2)	–	HRTEM	[38]
	(3,1)			
4H-SiC, SiH ₄ -C ₃ H ₈ , эпитаксия, 8°-off-cut подложка	(2,3,3,3)	Сложная структура	HRTEM Пик микроФЛ 430 нм при $T_{\text{комн}}$	[39]
	Нерегулярная структура	–	–	[38]

Сублимационный монокристаллический рост на призматических гранях $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ и $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ характеризуется отсутствием микропор, но сопровождается генерацией большого числа дефектов упаковки [31]. Структура образующихся дефектов в политепе 6H-SiC, определенная в [31] методом HRTEM, соответствует внешнему дефекту по Франку (4,3), а в политепе 4H-SiC – внутреннему дефекту по Франку (5,2) [40]. Возникновение дефектов

упаковки на плоскости $(1\bar{1}00)$ является следствием кинетически индуцированного процесса перегруппировки атомов на переограниченной поверхности [31].

Дефект (4,4) отмечается как наиболее часто встречающийся в эпитаксиально выращенном 4H-SiC. Этот дефект чрезвычайно чувствителен к начальным стадиям процесса роста эпитаксиального слоя [33] и к предварительной подготовке ростовой поверхности [36]. При оптимизации условий его плотность может быть снижена с 50 до 10 см^{-2} [33] или до очень низких значений при уменьшении скорости эпитаксиального роста $< 1\text{ см}^{-2}$ [36].

Диоды Шоттки на 4H-SiC с ростовыми дефектами упаковки (4,4)-типа характеризуются смещением прямых ветвей в низковольтную область [38]. Высота барьера Шоттки составляет 1,37 эВ (в среднем на 0,25 эВ ниже, чем у кристаллов без дефектов упаковки). Влияние дефектов упаковки на токи утечки не выявлено, по крайней мере, до 1000 В. В то же время приборы с дефектами упаковки имеют более низкие пробивные напряжения (на 20%) и высокие предпробойные утечки тока.

Дефекты упаковки в сильно легированных эпитаксиальных слоях 4H *p*-типа (Al, $p > 10^{21}\text{ см}^{-3}$), исследованные в работе [39], возникают вследствие конверсии из прорастающих дислокаций. В отличие от слоев *n*-типа электропроводности, эти дефекты, как правило, принадлежат к типу 2SF(6,2) и инициируются высоким уровнем напряжений в кристаллической решетке вследствие существенной разницы атомных радиусов кремния и алюминия.

Экспериментально наблюдавшиеся дефекты по Франку (5,2) подробно систематизированы в [36]. Показано, что возникновение дефекта упаковки связано с элементарной винтовой дислокацией, прорастающей из подложки или генерируемой в процессе эпитаксиального роста. Конверсия дислокации, имеющей вектор Бюргерса c [0001], с последующим расщеплением полной дислокации на частичные с векторами $c/4$ [0001] приводит к появлению четырех пространственно разделенных частичных дислокаций, локализованных на различных базисных плоскостях. Последовательность упаковки слоев в ядре дефекта меняется сложным образом:

$$(2,2) \rightarrow (2,5) \rightarrow (2,4,3,1) \rightarrow (2,4,1,2) \rightarrow (2,2)$$

или

$$(2,2) \rightarrow (5,2) \rightarrow (2,2,1,1,2) \rightarrow (2,2,1,1,5) \rightarrow (2,2).$$

Рассмотрены также более сложные сценарии возникновения (исчезновения) дефектов по Франку, наблюдающиеся экспериментально: парная генерация прорастающих винтовых дислокаций с противоположным вектором Бюргерса, соединенная дефектом по Франку, обратная конверсия дефекта по Франку в прорастающую дислокацию. Плотность дефектов упаковки (5,2) не зависит от состава газовой фазы или полярности грани, но во многом определяется плотностью прорастающих винтовых дислокаций в подложке, так как возникновение новых дефектов очень часто инициируется уже существующими [36].

Имеется сообщение о дефектах упаковки сложной структуры – (2,3,3,3) [39], что интерпретировано как результат последовательного наложения двух единичных дефектов по Шокли и дефекта по Франку:

$$(2,2)(2,2)(2,2) \rightarrow (2,3)(1,2)(2,2) \rightarrow (2,3)(1,2)(1,3) \rightarrow (2,3)(3,3)(2,2).$$

Дефекты упаковки в *p-i-n*-диодах. Известно, что при длительной работе *p-n*-перехода, смещенного в прямом направлении, в *p-i-n*-диодах на основе карбида

кремния наблюдается увеличение прямого падения напряжения. Дegradaция свойств приписывается возникновению и быстрому распространению дефектов упаковки в активной области прибора [41, 42].

Стандартная структура $p-i-n$ -диода на основе 4H-SiC представлена на рис.3 [42]. Она формируется на подложке n -типа проводимости с off-cut ориентацией (0001) (8° , реже 4° отклонения к $\langle 11\bar{2}0 \rangle$) и концентрацией доноров $5-6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Визуальная поверхность подложки обеспечивает послойный механизм эпитаксиального роста. На подложке методом химического осаждения из газовой фазы создается n -эпитаксиальный блокирующий слой с концентрацией носителей 10^{15} см^{-3} и толщиной от 12 до 100 мкм. На поверхности блокирующего слоя методом химического осаждения, ионной имплантации или диффузией алюминия создается p^+ -слой с концентрацией носителей $10^{18}-10^{19} \text{ см}^{-3}$. Толщина p -слоя варьируется от 0,5 до 3 мкм.

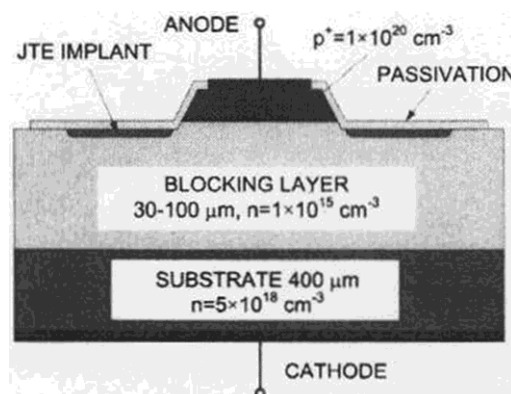


Рис.3. Структура $p-i-n$ -диода на основе 4H-SiC [42]

Структура дефектов упаковки, возникающих в активной области диодов на основе политипов 6H и 4H карбида кремния, определена в [43] методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения. Она соответствует изолированному однослойному дефекту по Шокли 1SF(3,1) и 1SF(4,2) для политипов 4H и 6H соответственно. При прямом смещении $p-n$ -перехода такие дефекты упаковки эффективно уменьшают время жизни неосновных носителей в n -блокирующем слое.

Активация процессов возникновения и скольжения дислокаций (как полных, так и частичных) в карбиде кремния при комнатной температуре не может быть объяснена чисто механическими причинами. В частности, в [44] показано, что дефекты упаковки успешно растут как при растягивающих, так и при сжимающих напряжениях, а также в диодах, сформированных на призматических гранях карбида кремния $\{1\bar{1}00\}$ и $\{11\bar{2}0\}$. Предполагается, что процесс разрастания дефектов происходит по так называемому механизму REDG (recombination-enhanced dislocation glide). В соответствии с этой теорией избыточную энергию для создания и роста дислокационных петель обеспечивает рекомбинация носителей при прямом смещении $p-n$ -перехода.

Для того чтобы рекомбинация способствовала росту дислокационного сегмента, вдоль линии дислокации должны присутствовать центры, которые, во-первых, являются эффективными центрами безызлучательной рекомбинации, а во-вторых, перенаправляют часть аккумулируемой энергии на образование и миграцию перегибов вдоль линии дислокации.

Так, в [41] показано, что наличие прямого смещения диода приводит к уменьшению энергии активации скольжения частичных дислокаций от 2,5 до 0,27 эВ, что хорошо согласуется с расчетами. Обнаружены два типа рекомбинационных центров, расположенных вдоль линии головной и, вероятно, замыкающей дислокации: центры излучательной рекомбинации с энергией перехода 1,8 эВ и безызлучательные с энергией 2,2 эВ [41]. Люминесцентные спектры Si(g)- и C(g)-дислокаций в 4H-SiC для различных уровней инжекции определены также в [45].

Дефекты упаковки возникают в блокирующем слое диода на основе карбида кремния в процессе работы в виде дислокационных петель или в результате расщепления существующих полных дислокаций. Дефект упаковки, как правило, ограничен сегментами 30-градусных частичных дислокаций с кремниевым или углеродным ядром с вектором Бюргерса $a/3 < 01\bar{1}0 >$, наблюдаются также 90-градусные и более сложные сегменты [46]. Отмечается, что сегменты с Si-ядром в отличие от углеродных подвижны и оптически активны [46].

Известно, что гомогенное зарождение дислокаций в объеме кристалла возможно или при крайне высоких напряжениях порядка $G/10$, где G – модуль сдвига, или при высоких температурах. В то же время отдельные диоды, сформированные на малой площади поверхности, часто не проявляют дрейфа прямого падения напряжения [47]. Эти факты могут свидетельствовать о том, что уже существующие в кристалле дефекты в процессе работы прибора инициируют возникновение дефектов упаковки. Наиболее типичным инициирующим дефектом считается базисная дислокация с вектором Бюргерса $a/3 < 11\bar{2}0 >$. Вследствие низкой энергии дефекта упаковки базисная дислокация может диссоциировать на две частичные дислокации Шокли, формируя дефект упаковки. Кроме того, показано, что дефекты упаковки могут зарождаться на прорастающих дислокациях [46], малоугловых границах раздела, искривленных прорастающих дислокациях и т.д. Наиболее вероятный механизм появления дефектов упаковки связан с зарождением дислокационных петель на изломах прорастающих краевых дислокаций, лежащих в базисной плоскости и имеющих чисто винтовой или смешанный характер [48]. Отмечается, что прорастающие винтовые и супервинтовые дислокации (микропоры) не инициируют возникновение дефектов упаковки, а все наблюдавшиеся источники дефектов упаковки могут быть интерпретированы как возникающие на сегментах дислокаций, лежащих в базисной плоскости. Базисные дислокации могут изменять направление линии дислокации и прорасти в эпитаксиальный слой за счет сил изображения [7] или возникать в активной области прибора за счет других механизмов.

Форма дефекта упаковки (ромб, треугольник, прямоугольник и др.) зависит от вида инициирующего источника и расположения дефекта относительно внешних границ.

Дефекты упаковки в сильно легированных слоях. Высокотемпературная обработка (отжиг в аргоне при температуре 1200 °C) или механическая нагрузка [49] сильно легированных азотом пластин 4H-SiC инициирует возникновение большого количества дефектов упаковки. Наблюдаются также as-grown дефекты упаковки. Комплексное использование методов ТЕМ, HRTEM и вторичной ионной масс-спектрометрии (ВИМС) показало, что генерация дефектов, причем всегда 2SF(6,2), наиболее сильно выражена при увеличении концентрации азота выше 10^{19} см^{-3} [49]. Кроме того, на пластинах карбида кремния с призматической ориентацией ($11\bar{2}0$) процесс возникновения дефектов упаковки протекает более легко и наблюдается при более низких концентрациях азота ($5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$). По всей видимости, эффект имеет электронную природу и может быть интерпретирован на основе теоретических результатов, представленных, например, в [50]. Уровень Ферми в кристалле 4H-SiC с концентрацией азота $1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ($T = 1150 \text{ °C}$) расположен на 0,3 эВ ниже края зоны проводимости, т.е. примерно на 0,4 эВ выше наименьшего уровня в квантовой яме, соответствующей 2SF(6,2) дефекту упаковки. Дефект упаковки, будучи двумерной квантовой ямой глубиной 0,6–0,7 эВ, может захватывать электроны из зоны проводимости, эффективно понижая энергию дефектного кристалла. Если энергия, высвобождаемая при передаче электронов из матрицы политипа 4H в квантовую яму, превысит энергию γ_A , необходимую для создания дефекта упаковки

площадью A , то кристалл с дефектами упаковки будет термодинамически более стабильным, чем бездефектный. При тех же условиях наименьшее состояние в квантовой яме, соответствующей наиболее простому дефекту 1SF, находится примерно на 0,1 эВ выше положения уровня Ферми. Возникновение дефектов 1SF термодинамически невыгодно.

Кинетический аспект проблемы связан с движением головных частичных дислокаций, ограничивающих дефект упаковки [50, 51]. Активационный барьер для движения быстрых головных частичных дислокаций (порядка 1,3 эВ [51]) может преодолеваться за счет термической энергии (отжиг) или термомеханической (процесс деформирования).

Необходимо отметить, однако, что возникновение дефектов 2SF(6,2) в эпитаксиальных слоях p -типа электропроводности [38] ставит под сомнение правомерность рассмотренного здесь механизма возникновения дефектов упаковки.

Заключение. Несмотря на большое количество структурных дефектов в слитках и эпитаксиальных слоях карбида кремния, ограничивающих приборное применение этого материала, в последние годы наметился существенный технологический прогресс, заключающийся в подавлении образования микропор – основного device-killing дефекта, характерного для пластин карбида кремния, выращенного на затравках с базисной ориентацией. В то же время механизм образования и стабильности микропор в слитках карбида кремния до сих пор не вполне ясен.

Одной из главных проблем создания высокоэффективных p - i - n -диодов на основе карбида кремния является временная нестабильность этих приборов, обусловленная возникновением и быстрым развитием дефектов упаковки в активной области приборов. Механизм появления дефектов упаковки не вполне ясен, но, наиболее вероятно, связан с целым набором инициирующих условий и дефектов. По всей видимости, основными инициирующими дефектами являются базисные дислокации и/или изломы прорастающих краевых дислокаций, лежащие в базисной плоскости. Следует отметить, что механизм генерации дефектов упаковки связан со свойствами всего дислокационного ансамбля карбида кремния.

Литература

1. Авров Д.Д., Лебедев А.О., Тауров Ю.М. Основные дефекты в слитках и эпитаксиальных слоях карбида кремния. I. Дислокационная структура и морфологические дефекты. Обзор // Изв. вузов. Электроника. – 2015. – Том 20. – № 3. – С. 225–238.
2. Heindl J., Strunk H.P., Heydemann V.D., Pensl G. Micropipes: hollow tubes in silicon carbide // Physica Status Solidi A. – 1997. – Vol. 162. – Iss. 1. – P. 251–262.
3. The mechanism of micropipe nucleation at inclusions in silicon carbide / M. Dudley, X.R. Huang, W. Huang et al. // Appl. Phys. Lett. – 1999. – Vol. 75. – Iss.6. – P. 784–786.
4. Growth of SiC substrates / A. Powell, J. Jenny, S. Muller et al. // Intern. J. of High Speed Electronics and Systems. – 2006. – Vol. 16. – N.3 – P. 751–778.
5. Stein R.A. Formation of macrodefects in SiC // Physica B: Condensed Matter. – 1993. – Vol. 185. – Iss.1–4. – P. 211–216.
6. Frank F.C. Capillary equilibria of dislocated crystals // Acta Crystallogr. – 1951. – Vol. 4. – Iss.6. – P. 497–501.
7. Friedel J. Dislocations. – Oxford: Pergamon Press, 1964. – 644 p.
8. Vetter W.M., Dudley M. Micropipes and the closure of axial screw dislocation cores in silicon carbide crystals // J. Appl. Phys. – 2004. – Vol. 96. – Iss.1. – P. 348–353.
9. Golightly J.P. Hollow screw dislocation cores in silicon carbide // Z. Kristallogr. – 1969. – Vol. 130. – Iss.1–6. – P. 310–313.

10. **Sunagawa I., Bennema P.** Observations of the influence of stress fields on the shape of growth and dissolution spirals // *J. Cryst. Growth.* – 1981. – Vol. 53. – Iss. 3. – P.490–504.
11. **Tanaka H., Uemura Y., Inomata J.** Observations of holes around dislocation core in SiC crystal // *J. Cryst. Growth.* – 1981. – Vol. 53. – Iss. 3. – P. 630–632.
12. **Van der Hoek B., Van der Eerden J.P., Bennema P.** Some methods for the quantitative estimation of crystal growth parameters from observed step patterns // *J. Cryst. Growth.* – 1982. – Vol. 56. – Iss. 1. – P. 108–124.
13. **Krishna P., Jiang S.-S., Lang A.R.** An optical and X-ray topographic study of giant screw dislocations in silicon carbide // *J. Cryst. Growth.* – 1985. – Vol. 71. – Iss.1. – P. 41–56.
14. The relationship between micropipes and screw dislocations in PVT grown 6H-SiC / **J. Giocondi, G.S. Rohrer, M. Skowronski et al.** // *MRS Symposium Proceedings.* – 1996. – Vol. 423. – P. 539. doi:10.1557/PROC-423-539.
15. Quantitative analysis of screw dislocations in 6H-SiC single crystals / **M. Dudley, W. Si, S. Wang et al.** // *Nuovo Cimento Soc. Ital. Fis. D.* – 1997. – Vol. 19. – Iss. 2–4. – P. 153–164.
16. Formation of micropipes in SiC under kinetic aspects / **J. Heindl, W. Dorsch, R. Eckstein et al.** // *J. Cryst. Growth.* – 1997. – Vol. 179. – Iss. 3–4. – P. 510–514.
17. **Van der Hoek B., Van der Eerden J.P., Bennema P.** Thermodynamical stability conditions for the occurrence of hollow cores caused by stress of line and planar defects // *J. Cryst. Growth.* – 1982. – Vol. 56. – Iss. 3. – P. 621–632.
18. **Srolovitz D.J., Safran S.A.** Capillary equilibria of surfaces intersected by dislocations // *Philosophical Magazine A.* – 1985. – Vol. 52. – Iss. 6. – P. 793–800.
19. Dislocations as a source of micropipe development in the growth of silicon carbide / **D.I. Cherednichenko, Y.I. Khlebnikov, I.I. Khlebnikov et al.** // *J. Appl. Phys.* – 2001. – Vol. 89. – Iss. 7. – P. 4139–4141.
20. **Ma X.** Superscrew dislocations in silicon carbide: dissociation, aggregation, and formation // *J. Appl. Phys.* – 2006. – Vol. 99. – Iss.6. – 063513. – 6 p.
21. X-ray «magnifying» imaging investigation of giant Burgers vector micropipe-dislocations in 4H-SiC / **J. Hartwig, J. Baruchel, H. Kuhn et al.** // *Nuclear Instr. and Methods in Physics Research B.* – 2003. – Vol. 200. – P. 323–328.
22. **Pirouz P.** On micropipes and nanopipes in SiC and GaN // *Philosophical Magazine A.* – 1998. – Vol. 78. – Iss. 3. – P. 727–736.
23. **Mahajan S.** Origins of micropipes in SiC crystals // *Appl. Phys. Lett.* – 2002. – Vol. 80. – Iss. 23. – P. 4321–4323.
24. **Ma X.** A method to determine superscrew dislocation structure in silicon carbide // *Mater. Sci. Engineer. B.* – 2006. – Vol. 129. – Iss. 1–3. – P. 216–221.
25. Structural macro-defects in 6H-SiC wafers / **R.C. Glass, L.O. Kjellberg, V.F. Tsvetkov et al.** // *J. Cryst. Growth.* – 1993. – Vol. 132. – Iss. 3–4. – P. 504–512.
26. Origin of domain structure in hexagonal silicon carbide boules grown by the physical vapor transport method / **S. Ha, N.T. Nuhfer, G.S. Rohrer et al.** // *J. Cryst. Growth.* – 2000. – Vol. 220. – Iss. 3. – P. 308–315.
27. Evolution and structure of low-angle grain boundaries in 6H-SiC single crystals grown by sublimation method / **Y. Gao, X. Hu, X. Chen et al.** // *J. Cryst. Growth.* – 2010. – Vol. 312. – Iss. 20. – P. 2909–2913.
28. Behavior of basal plane dislocations and low angle grain boundary formation in hexagonal silicon carbide / **Y. Chen, G. Dhanaraj, W. Vetter et al.** // *Mater.Sci.Forum.* – 2007. – Vol. 556–557. – P. 231–234.
29. Structural properties of subgrain boundaries in bulk SiC crystals / **M. Katsuno, N. Ohtani, T. Aigo et al.** // *J. Cryst. Growth.* – 2000. – Vol. 216. – Iss. 1–4. – P. 256–262.
30. **Schmitt E., Straubinger T., Rasp M., Weber A.-D.** Defect reduction in sublimation grown SiC bulk crystals // *Superlattices and Microstructures.* – 2006. – Vol. 40. – Iss. 4–6. – P. 320–327.
31. **Takahashi J., Ohtani N., Katsuno M., Shinoyama S.** Sublimation growth of 6H- and 4H-SiC single crystals in the and directions // *J. Cryst. Growth.* – 1997. – Vol. 181. – Iss. 3. – P. 229–240.
32. **Feng G., Suda J., Kimoto T.** Characterization of stacking faults in 4H-SiC epilayers by room-temperature microphotoluminescence mapping // *Appl. Phys. Lett.* – 2008. – Vol. 92. – Iss. 22. – 221906. – 3 p.
33. **Feng G., Suda J., Kimoto T.** Characterization of major in-grown stacking faults in 4H-SiC epilayers // *Physica B: Condensed Matter.* – 2009. – Vol. 404. – Iss. 23–24. – P. 4745–4748.
34. Cathodoluminescence study of the properties of stacking faults in 4H-SiC homoepitaxial layers / **S. Maximenko, J.A. Freitas, Jr., P.B. Klein et al.** // *Appl. Phys. Lett.* – 2009. – Vol. 94. – Iss. 9. – 092101. – 3 p.

35. **Izumi S., Tsuchida H., Kamata I., Tawara T.** Structural analysis and reduction of in-grown stacking faults in 4H-SiC epilayers // Appl. Phys. Lett. – 2005. – Vol. 86. – Iss. 20. – 202108. – 3 p.
36. **Tsuchida H., Kamata I., Nagano M.** Formation of basal plane Frank-type faults in 4H-SiC epitaxial growth // J. Cryst. Growth. – 2008. – Vol. 310. – Iss. 4. – P. 757–765.
37. **H.Fujiwara, T.Kimoto, T.Tojo, H.Matsunami** Characterization of in-grown stacking faults in 4H-SiC (0001) epitaxial layers and its impacts on high-voltage Schottky barrier diodes // Appl. Phys. Lett. – 2005. – Vol. 87. – Iss. 5. – 051912. – 3 p.
38. **Song H.K., Moon J.H., Kim H.J., Mehregany M.** Observation of stacking faults formed during homoepitaxial growth of p-type 4H-SiC // Appl. Phys. Lett. – 2009. – Vol. 94. – Iss. 11. – 112109. – 3 p.
39. Structural and electronic characterization of (2,33) bar-shaped stacking fault in 4H-SiC epitaxial layers / **M. Camarda, A. Canino, A. La Magna et al.** // Appl. Phys. Lett. – 2011. – Vol. 98. – Iss. 5. – 051915. – 3 p.
40. **Fadeev A.Yu., Lebedev A.O., Tairov Yu.M.** Growth of 4H silicon carbide crystals on a (11-22) seed // Semiconductors. – 2012. – Vol. 46. – Iss. 10. – P. 1346–1349.
41. **Galeckas A., Linnros J., Pirouz P.** Recombination-enhanced extension of stacking faults in 4H-SiC p-i-n diodes under forward bias // Appl. Phys. Lett. – 2002. – Vol. 81. – Iss. 5. – P. 883–886.
42. **Skowronski M., Ha S.** Degradation of hexagonal silicon-carbide-based bipolar devices // J. Appl. Phys. – 2006. – Vol. 99. – Iss. 1. – 011101. – 24 p.
43. Structure of recombination-induced stacking faults in high-voltage SiC p-n junctions / **J.Q. Liu, M. Skowronski, C. Hallin et al.** // Appl. Phys. Lett. – 2002. – Vol. 80. – Iss. 5. – P. 749–751.
44. Structural instability of 4H-SiC polytype induced by n-type doping / **J.Q. Liu, H.J. Chung, T. Kuhr et al.** // Appl. Phys. Lett. – 2002. – Vol. 80. – Iss. 12. – P. 2111–2113.
45. **Liu K.X., Stahlbush R.E., Maximenko S.I., Caldwell J.D.** Differences in emission spectra of Si- and C-core partial dislocations // Appl. Phys. Lett. – 2007. – Vol. 90. – Iss. 15. – 153503. – 3 p.
46. **Ha S., Benamara M., Skowronski M., Lendenmann H.** Core structure and properties of partial dislocations in silicon carbide p-i-n diodes // Appl. Phys. Lett. – 2003. – Vol. 83. – Iss. 24. – P. 4957–4959.
47. Long term operation of 4.5kV PiN and 2.5kV JBS diodes / **H. Lendenmann, F. Dahlquist, N. Johansson et al.** // Mater.Sci.Forum. – 2001. – Vol. 353–356. – P. 727–730.
48. **Maximenko S.I., Pirouz P., Sudarshan T.S.** Investigation of the electrical activity of partial dislocations in SiC p-i-n diodes // Appl. Phys. Lett. – 2005. – Vol. 87. – Iss. 3. – 033503. – 3 p.
49. Nitrogen doping and multiplicity of stacking faults in SiC / **P. Pirouz, M. Zhang, H. McD. Hobgood et al.** // Philosophical Magazine. – 2006. – Vol. 86. – Iss. 29–31. – P. 4685–4697.
50. **Lambrecht W.R.L., Miao M.S.** Electronic driving force for stacking fault expansion in 4H-SiC // Phys.Rev. B. – 2006. – Vol. 73. – Iss. 15. – 155312. – 6 p.
51. Study of Shockley partial dislocation mobility in highly N-doped 4H-SiC by cantilever bending / **H. Idrissi, G. Regula, M. Lancin et al.** // Physica Status Solidi (c). – 2005. – Vol. 2. – Iss. 6. – P. 1998–2003.

Обзор поступил
30 мая 2014 г.

Азров Дмитрий Дмитриевич – кандидат технических наук, старший научный сотрудник кафедры микро- и нанoeлектроники Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина) (СПбГЭТУ «ЛЭТИ»). *Область научных интересов:* фазовые равновесия, физика и технология роста широкозонных полупроводников.

E-mail: siclab-tairov@yandex.ru

Лебедев Андрей Олегович – доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН (г. Санкт-Петербург). *Область научных интересов:* рентгеновские методы исследования, физика и технология роста объемных монокристаллов карбида кремния.

Таиров Юрий Михайлович – доктор технических наук, профессор кафедры микро- и нанoeлектроники СПбГЭТУ «ЛЭТИ». *Область научных интересов:* физика и технология материалов электронной техники.