

ПОЛУЧЕНИЕ МОНОКРИСТАЛЛОВ SiC, ЕГО ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ И РАСЧЕТ ИХ ТЕПЛОВЫХ, ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ

Г.К. Сафаралиев¹, А.В. Санкин², В.И. Алтухов², Н.И. Каргин³

¹Дагестанский государственный университет, г. Махачкала;

²Северо-Кавказский федеральный университет, г. Ставрополь, zam-id@pfncfu.ru;

³Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», г. Москва, krgn@yandex.ru

GETTING MONOCRYSTALS OF SiC, IT'S SOLID SOLUTIONS AND CALCULATING THEIR THERMAL, ELECTRICAL PROPERTIES

G.K. Safaraliyev¹, A.V. Sankin², V.I. Altukhov², N.I. Kargin³

¹Dagestan State University, Makhachkala;

²North Caucasus Federal University, Stavropol, zam-id@pfncfu.ru;

³National Nuclear Research University «МЕРФИ», Moscow, krgn@yandex.ru

Дано описание технологий получения монокристаллов 4H-SiC и твердых растворов SiC-AlN [1,3]. Запатентована новая методика получения монокристаллов SiC [3]. Рассчитана теплопроводность политипов 4H-SiC с учетом фазового перехода при $T_p=1543,16^\circ\text{C}$ и электропроводность твердых растворов SiC-AlN при разных составах x .

The description of technologies for obtaining 4H-SiC monocrystals and SiC-AlN solid solutions has been given. A new method of obtaining SiC monocrystals has been patented. The thermal conductivity of 4H-SiC polytypes is calculated, taking into account the phase transition at $T_p=1543.16^\circ\text{C}$ and the electrical conductivity of the SiC-AlN solid solutions at different compositions of x .

Получение совершенных монокристаллов SiC актуально. По заключению фирмы CREE именно карбид кремния является основным перспективным материалом силовой электроники. Технология получения кристаллов SiC, его твердых растворов SiC-AlN и пленок на их основе имеет свою историю [1,3-5]. Главным недостатком этих технологий является отсутствие возможности надежного контроля над величинами рабочих градиентов температур и появления в кристалле большого количества механических напряжений, трещин и примесей.

1. В настоящей работе предлагается новое техническое решение, позволяющее реализовать получение монокристаллов 4H-SiC методом управляемого высокотемпературного индукционного нагрева. Предлагаемое устройство содержит новые существенные элементы, подходы - методы [3] (см. рисунок 1):

- введение дополнительных колебательных контуров для управления процессом сублимации;
- применение метода последовательных приближений – итераций с последующей статистической обработкой предварительных измерений текущих температур для обеспечения оптимального режима сублимации.

Структура устройства для получения совершенных монокристаллов карбида кремния показана на рисунке 1. Дополнительный колебательный контур (4) позволяет поддерживать необходимые градиенты температур с высокой точностью за счет подстроечных конденсаторов, обеспечивающих резонансный режим с индуктором (3) – основным колебательным контуром. Стабильность режима сублимации поддерживается путем изменения электрических и пространственных параметров дополнительных управляемых колебательных контуров.

В данной технологии стабильные значения градиентов температур ($1 \div 4^\circ\text{C}/10^{-3}\text{m}$) обеспечиваются с высокой точностью предварительными измерениями текущих температур, с накоплением их значений в базе данных с последующей статистической обработкой для обеспечения оптимального режима сублимации.

2. Устройство. Настоящая установка с управляемым индукционным нагревом для выращивания совершенных кристаллов позволила получить опытные образцы керамики, пленки карбида кремния и диоды Шоттки на основе SiC [2,5] (см. рис.2).

Таким образом:

- запатентован способ получения совершенных монокристаллов SiC [3] (устройство для получения совершенных монокристаллов карбида кремния с дополнительными регулируемыми контурами индукционного нагрева. Патент на полезную модель № 173041) .

-полученные авторами данные и рассчитанные новые характеристики диодов имеют важное прикладное значение в быстро развивающейся в настоящее время силовой и микро-нано электронике.

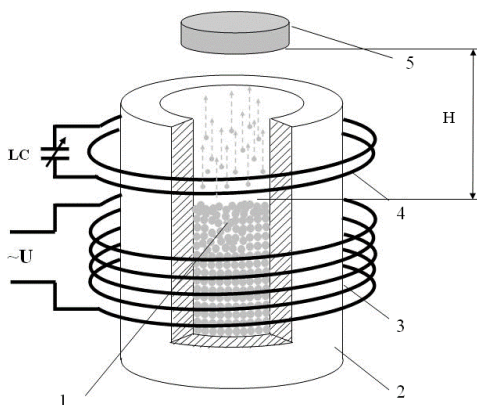


Рис. 1 - Схема устройства для получения совершенных монокристаллов карбида кремния (SiC) с использованием высокотемпературного индукционного нагрева. 1 - источник с шихтой карбида кремния; 2 - корпус ростовой камеры (тигель); 3 - индуктор (индукционная катушка); 4 - дополнительный колебательный контур; 5- затравочный монокристалл

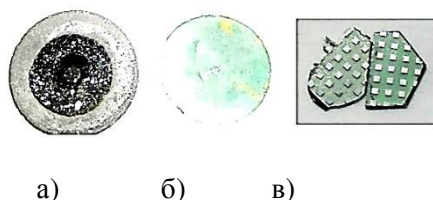


Рис. 2 - Опытные образцы и примеры изделий: керамика (а), карбид кремния (б) изделия на основе SiC -диоды (в) [2-5]

3. Теплопроводность SiC, его политипов и твердых растворов SiC-AlN. Наиболее важным среди модификаций (политипов) кристаллического карбида кремния являются политипы с гексагональной ячейкой 4H-SiC, 6H-SiC и кубической элементарной ячейкой 3C-SiC. Почти во всех политипах SiC атомные слои с кубической (C) и гексагональной (H) симметрией чередуются в строгом порядке в направлении C – оси по типу одномерной сверхрешетки. При этом данные по температурной зависимости теплопроводности $K(T)$ карбида кремния (SiC), в отличие от ряда других механических, диэлектрических характеристик, обнаруживают заметную зависимость от характера политипа при низких температурах. А с другой стороны, данные по $K(T)$ при высоких температурах обнаруживают наличие фазового превращения при $T_n=1543,16^\circ\text{C}$ в поликристаллических образцах β – SiC.

С учетом наличия в системе фазового перехода, неупругое рассеяние тепловых фононов ω на критических $\omega_0 = \omega_0(T)$ можно представить в виде [3]:

$$\gamma_c(\omega) = \begin{cases} \frac{\pi \hat{A}_0 \omega}{\beta \omega_0}, & \text{где } \omega \tau_{on} \gg 1; \\ \frac{\sqrt{\pi} \hat{A}_0}{\beta} \frac{\omega}{\omega_0} \frac{\omega \tau_{on}}{1 + (\omega \tau_{on})^2}, & \text{где } \omega \tau_{on} \ll 1, \end{cases}$$

где \hat{A}_0 – коэффициент пропорциональности. В простой классической модели мягкой моды $\omega_0(\hat{O}) = r_0(T) \alpha_0 |T - T_l|$, ($r_0 = 1$ при $T > T_{II}$ и $r_0 = 2$ при $T < T_{II}$); τ_{on} – среднее время жизни критических фононов, α_0 – постоянная, \hat{O} – волновой вектор мягкого фонона, $\beta^{-1} = k_B T$. Результаты расчетов кривых $K(T)$ для SiC представлены на рис. 3.

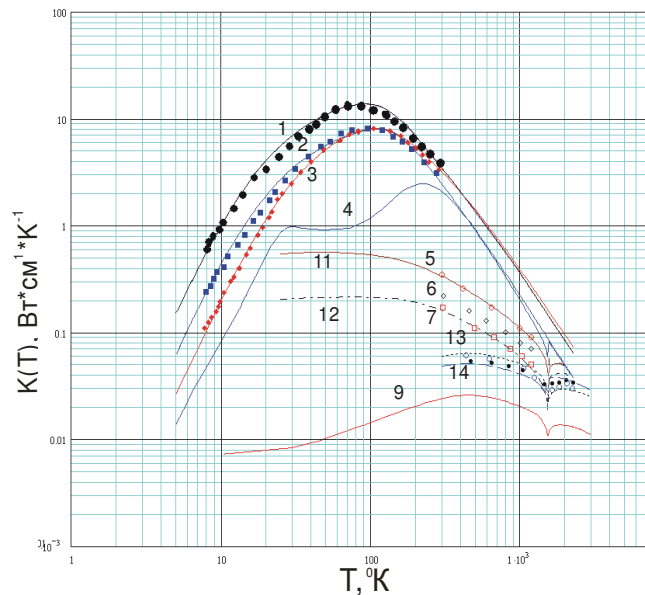


Рис. 3 - Расчет температурной зависимости теплопроводности кристаллов SiC с учетом фазового перехода при $T_n = 1543,16$ °C: кривые 1-4, 9, 11, 12 – теория; точки – эксперимент: 5-7 твердые растворы [1,4]; точки 13, 14 - с фазовым превращением [6]

Вблизи температуры T_{II} фазового превращения неупругое рассеяние фононов играет доминирующую роль и определяет характер аномального поведения теплового сопротивления около T_{II} . Предложенные методы и модели для расчета тепловых свойств твердых растворов на основе карбида кремния и проведенный численный расчет кривой $K(T)$ качественно и количественно согласуются с поведением кривых теплопроводности исследуемых кристаллов [4,6]. Подобранные в ходе вычислений параметры времен релаксации фононов отвечают физически обоснованным представлениям о характере рассеяния тепловых фононов в кристаллах карбида кремния и твердых растворах на его основе [3].

В частности, для рассмотренных политипов SiC были подобраны следующие значения параметров времени релаксации $\gamma_0(x)$ в «чистых» кристаллах политипов (см. Таблица 1):

Таблица 1:

Значения параметров времени релаксации для политипов SiC.

Политип	A	B	D	α
4H-SiC	$8,5 \cdot 10^4$	10^5	100	340
6H-SiC	$9 \cdot 10^4$	10^5	100	460
3C-SiC	$6 \cdot 10^5$	10^5	100	250

4. Электропроводность твердых растворов на основе SiC как функции температуры. Фазовый переход Мотта. В твердых растворах SiC, при достаточно больших составах (x) образуются примесные зоны из глубоких – атомарный кислород (O): $E_c - 0,90 \div 0,95$; ванадий (V): $E_c - 0,7 \div 0,97$ эВ) и мелких – нитрид (N): $E_c - 0,081 \div 0,142$; и алюминий (Al): $E_c + 0,10 \div 0,27$ эВ) разрешенных состояний примесей а также их комплексов – нанокластеров в запрещенной зоне E_g от 3 до 6 эВ.

При проведении расчетов электропроводности нами были использованы данные для энергий активации примесной проводимости $\Delta E_1 \approx 0,987$ эВ и $\Delta E_2 \approx 0,123$ эВ [4] (см. рис. 4).

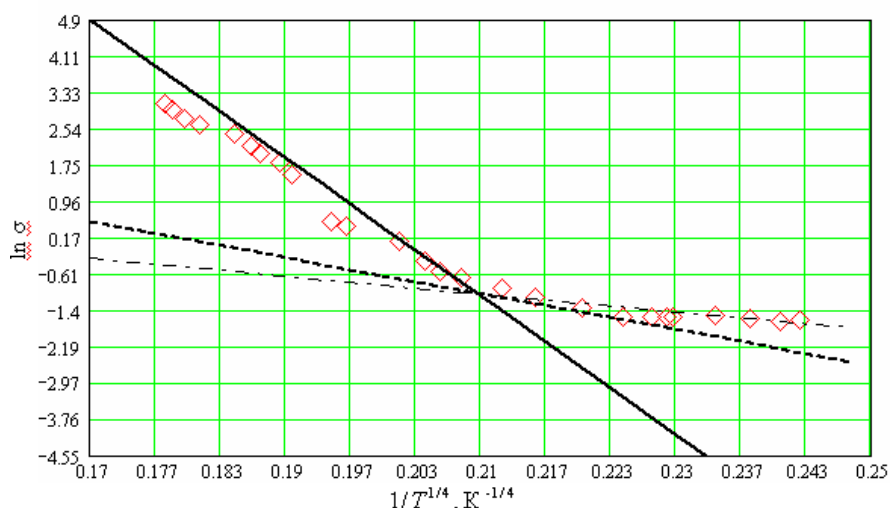


Рис. 4 - Удельная проводимость растворов SiC–AlN.

Пунктирная и сплошная линии – теория расчет $\ln \sigma(1000/T)$ с осью $x = 1000/T$.

Штрихпунктирная – расчет $\ln \sigma(1/T^{1/4})$ - переход Мотта; знак \diamond - эксперимент [1,4]

Проведенные расчеты и сопоставление их результатов с данными опытов подтверждают предположения о наличии в твердых растворах SiC примесных зон и перехода Мотта металл-диэлектрик. В работе предложена модель температурной зависимости электропроводности растворов $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$ и $(\text{SiC})_{1-x}(\text{BeO})_x$ при разных составах x . В логарифмическом масштабе построены зависимости $\ln(\sigma)$ для растворов $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$ и $(\text{SiC})_{1-x}(\text{BeO})_x$. Обосновано наличие перехода Мотта и андерсоновской локализация в растворах $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$ и $(\text{SiC})_{1-x}(\text{BeO})_x$. Рассчитана зависимость проводимости растворов $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$ и $(\text{SiC})_{1-x}(\text{BeO})_x$ от состава x . Обнаружена немонотонная зависимость около $x=x_0$ от состава x , что характерно для локализации носителей по Андерсону. Результаты расчетов согласуются с данными экспериментов [1,4]. При низких температурах $T < 400$ °C наблюдается переход Мотта и $\ln(\sigma/\sigma_0) \approx (\varepsilon_a/T)^{1/4}$; ε_a – характеристическая энергия. Эта зависимость подтверждается экспериментальными данными [1,4] при $T < 400$ °C (см. рис.4).

Таким образом, показано, что в твердых растворах карбида кремния при температурах менее 400 °C реализуется зависимость в соответствии с механизмом фазового перехода Мотта металл-диэлектрик. При высоких температурах $T > 400$ °C механизм переноса заряда осуществляется в соответствии с теорией локализации носителей Андерсона.

Список использованных источников:

1. Сафаралиев Г.К. Твердые растворы на основе карбида кремния. М., 2011. 296 с.
2. Сафаралиев Г. К., Билалов Б. А., Курбанов М. К. , Алтухов В.И., Санкин А.В. , Касьяненко И.С. Расчет высоты барьера Шоттки на контакте металла с полупроводниковым твердым раствором $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$. Микроэлектроника, Элементы интегральных схем, 2015, том 44, № 6, С. 453–458
3. Санкин А.В., Алтухов В.И., Казаров Б.А., Касьяненко И.С., Осмоловский Л.М. Устройство для получения совершенных монокристаллов карбида кремния с дополнительными регулируемыми контурами индукционного нагрева. Патент на полезную модель №173041.
4. Б.А. Билалов. Процессы формирования и электрофизические свойства гетероструктур карбида кремния – твердые растворы на основе карбида кремния; докт. дисс. ДГУ, Махачкала, 2001.
5. Г.К. Сафаралиев, Н.И. Каргин, М.К. Курбанов, Б.А. Билалов, Ш.М. Рамазанов, А.С. Гусев. Исследование влияния параметров режимов обработки на высоту потенциального барьера структуры $\text{Me}/(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x//$ Вестник НИЯУ «МИФИ», 2014, том 3, №1, С.63-67.
6. Карбид кремния. Под ред. Г. Хениша и Р. Роя – М.: Мир 1972, 354 с.