

4H-SiC 同质外延的绿带发光与缺陷的关系 *

贾仁需[†] 张义门 张玉明 郭 辉 栾苏珍

(西安电子科技大学微电子学院 宽禁带半导体材料与器件教育部重点实验室 西安 710071)

(2008年1月24日收到 2008年2月29日收到修改稿)

利用室温光致发光谱(PL)对 CVD 法生长的 4H-SiC 同质外延特性进行研究,发现有绿带发光(GL)特性。用扫描电子显微镜(SEM)、二次离子质谱(SIMS)和 X 射线光电子谱(XPS)技术获得了 4H-SiC 样品纵截面形貌和元素相对含量分布,结果表明,GL 与 4H-SiC 晶体中碳空位(V_c)及络合体缺陷相关, V_c 和缓冲层的扩展缺陷(点缺陷和刃位错等)是 GL 微观来源,GL 的半峰宽(FWHM)反映了参与复合发光的 V_c 及其络合缺陷能级分散的程度。室温下获得的样品 GL 强度和光谱波长可用于分析 4H-SiC 外延中缺陷分布和晶体质量。

关键词:绿带发光,4H-SiC 同质外延,晶体缺陷

PACC:7155E, 7855C

1. 引言

碳化硅(SiC)以其优异的物理特性和电学特性而备受关注,如高的热传导率、高的击穿电场、高的饱和漂移速度和高的抗辐照特性等。因此,SiC 电子器件非常适合在高温、高频和大功率等特殊环境下工作^[1-2]。目前,4H-SiC 单晶是制备 SiC 电子器件的主要材料之一。体生长的单晶 4H-SiC 存在很多缺陷,严重影响器件的性能^[3-4],必须在单晶 SiC 表面外延一层高质量的外延薄膜来满足器件制备的要求。因此配合工艺条件的 4H-SiC 外延薄膜的质量检测显得尤为重要。光学测试技术具有无接触、测试精度高和无污染破坏晶片等优点^[5]。室温光致发光光谱(RT-PL)^[6]是一种无需变温、快速和无损伤的测试技术,因此室温光致发光光谱(RT-PL)成为研究 4H-SiC 外延薄膜光学和晶体质量的重要手段之一。

在 4H-SiC 的室温光致发光谱中,绿带发光(GL)普遍出现在各种工艺和衬底上外延的非故意掺杂和掺杂的 4H-SiC 中。虽然对其来源的认识至今仍在研究讨论之中,但都认为晶体缺陷结构是造成 GL 的主要原因^[7-10]。因此,GL 谱包含着与之相关的晶体缺陷信息。通过解读 GL 谱,可以获得对 4H-SiC 外延薄膜晶体质量和缺陷的深入认识。本文利用室温 PL

技术,研究了 4H-SiC 室温下的 PL 谱。通过 SEM、XPS、SIMS 等测试手段,分析了样品的形貌和物质组成,对于绿带发光(GL)的机理给出一种合理的解释。

2. 样品及实验条件

本实验样品制备采用瑞典 Epigress 公司的 VP508 水平式低压热壁 CVD 系统^[11]。衬底为德国 SiCrystal AG 公司提供的 Si 面,偏离(0001)面 8° 的 2 英寸 n 型 4H-SiC 单晶,掺杂浓度约为 $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 。制备过程中 SiH_4 (20 ml/min), C_3H_8 (10 ml/min)作为 Si 源和 C 源,高纯 TMA 作为掺杂的 Al 源,氢气为载气进入反应室。外延样品生长温度在 1570°C,压强为 10 kPa。样品 1,2 为 Al 掺杂 p 型 4H-SiC,载流子浓度分别为 $1.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $1.1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 。

实验中所用光致发光谱(PL 谱)的激发光源是 HeCr 激光器,波长为 325 nm,最大激发功率为 5 mW。发射光经光栅单色仪分光,由光电倍增管接受后,通过计算机采样收集数据。所用的扫描电子显微镜型号为 JSM-6360,对外延和衬底的纵向面进行了观测。用 Axis Ultra Kratus(UK)光电子能谱仪测量样品,测量时 $\text{K}\alpha$ 射线入射角为 90°,工作方式为宽扫描和窄扫描,样品室真空度为 $10^{-7} \times 1.333 \text{ Pa}$ 。

* 国家重点基础研究发展计划(973)批准号 51327020202 和西安-应用材料创新基金(批准号 XA-AM-200704)资助的课题。

† E-mail: rxjia@mail.xidian.edu.cn

3. 实验结果和分析

图 1 为样品中心点的 PL 谱图。发现样品 1、2 主要发光带是峰位分别为 552.15 nm 和 573.08 nm 很宽的绿光激发, 呈高斯分布。如果考虑发光为施主-受主复合引起的, 根据辐射光子的能量, 有

$$h\nu = E_g - (E_A + E_D) + e^2/\epsilon_r, \quad (1)$$

室温(300 K)时, $E_g = 3.23$ eV, $E_A = 0.22$ eV, $E_D = E_N = 0.06$ eV, 计算出理论输出波长为 420.3 nm, 与室温 PL 测试结果有很大的差距。因此在禁带中存在能级 E_x , 当电子从浅能级跃迁到 E_x 再与受主复合时产生了绿光。

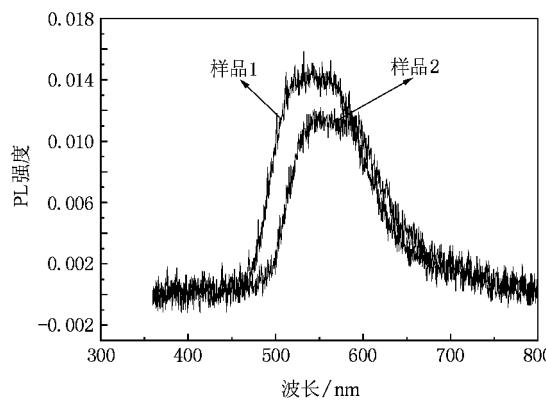


图 1 4H-SiC 外延样品 RT-PL 谱图

为了进一步了解发光波长偏移的原因, 对 4H-SiC 外延样品的纵剖面进行了 SEM 测试, 如图 2 所示。根据截面图中纹理方向的不同, 可以清楚的看到样品分为 3 层, 左面很厚的区域为 n 型 4H-SiC 单晶衬底, 右边 3.99 μm 厚的区域为 p 型的 4H-SiC 外延层, 中间大约 1.10 μm 的区域认为是外延和衬底之间形成的缓冲层。缓冲层是由于衬底和外延的晶型不同引起的, 其中必然存在很多的堆垛缺陷(SF)、层错和位错。这些缺陷会向外延中延伸并不断分化, 产生很多点缺陷和刃位错^[12,13]。

利用 SIMS 技术测定了样品 1、2 中的 Si 组分随外延厚度的变化关系, 如图 3 所示。从图 3 给出的结果可以看到, 样品 1、2 中的 Si 组分在整个外延层中分布比较均匀。样品 1 中 Si 的含量稍高于样品 2 中的含量。通过 XPS 测试得到样品表面 C 和 Si 元素的含量比分别为 57.22/42.78 和 62.72/37.28。关于绿光的起源, 有两种不同的看法: 一种认为是由 C 空

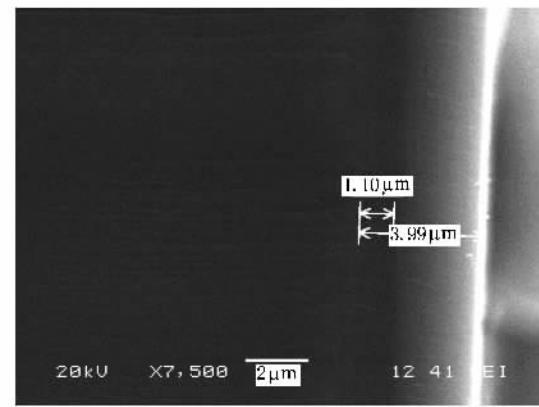


图 2 4H-SiC 外延样品的纵剖面 SEM 图

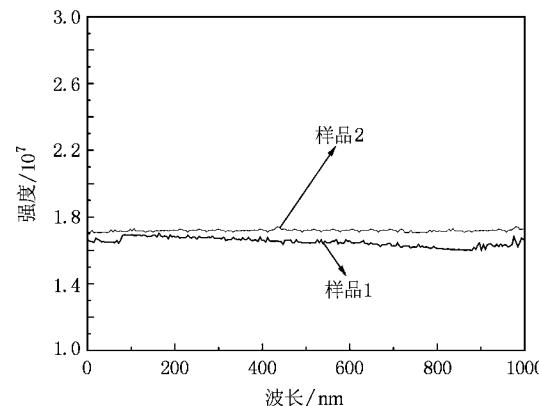


图 3 Si 在 4H-SiC 同质外延中的分布情况

位引起的浅施主-深受主对跃迁(DAP)产生的^[7-9]; 一种认为是源于衬底界面的扩展缺陷能级引发的, 如与晶体的平面位错、螺位错等引入的缺陷能级有关^[10]。通过以上测试分析发现: 随着样品中 Si 元素含量减少, 常温 PL 的发光强度变大、波长变短; 样品在衬底和外延之间存在缓冲层。我们认为: 光致发光是发光中心从激发态至基态的复合跃迁引起的, GL 光谱主要是由很多能级水平接近的相关高能缺陷态(浅施主 V_N)向低能态的跃迁组成。C 空位的存在, 产生很多点缺陷; 而缓冲层延伸和分化的扩展缺陷所围绕的应力区可能增加 C 空位的数量。因此深受主能级与 C 空位产生的 V_C 和扩展缺陷都相关, 是由二者结合形成的。GL 的半峰宽(FWHM)反映了参与复合发光的 V_C 及其结合缺陷能级分散的程度。在实验中, 样品 1 中 C 空位 V_C 和扩展缺陷多于样品 2, 使得它的 RT-PL 光谱的强度大于样品 2, 发光波长涵盖范围也比样品 2 广。

4. 结 论

利用室温光致光谱技术研究了 CVD 法生长的 Al 掺杂 4H-SiC 同质外延 GL 特点,发现 GL 强度与薄膜的晶体缺陷密切相关,这可作为工艺在线质量

检测中重要而方便的手段。二次离子质谱(SIMS)和 X 射线光电子谱(XPS)结果表明,GL 与 4H-SiC 晶体中 V_C 及络合体缺陷相关,GL 的半峰宽(FWHM)反映了参与复合发光的 V_C 及其络合缺陷能级分散的程度。

- [1] Elasser A , Pchow T 2002 *Prec . IEEE* **90** 969
- [2] Waldrop J R , Grant R W , Wang Y C , Davies R F 1992 *J . Appl . Phys .* **72** 4757
- [3] Cochran C J , Lenahan P M 2007 *Appl . Phys . Lett .* **90** 123501
- [4] Dautrich M S , Lenahan P M 2006 *Appl . Phys . Lett .* **89** 223502
- [5] Yugami H , Nakashima S , Mitsuishi A , Uemonto A , Furukawa K , Suzuki A , Nakajima S 1987 *J . Appl . Phys .* **61** 354
- [6] Tajima M , Tanaka M , Hoshimo N 2002 *Mater . Sci . Forum* **389-393** 597
- [7] Korsunska N E , Tarasov I , Kushnirenko V , Ostapenko S 2004 *Semicond , Sci . Technol .* **19** 833
- [8] Lauer V 1999 *Mater . Sci . Eng . B* **61-62** 248
- [9] Ivanov V Y 2008 *Opt . Mater .* **30** 748
- [10] Calcagno L 2007 *J . Appl . Phys .* **102** 043523
- [11] <http://www.epigress.se>
- [12] Sakwe S A , Müller R , Queren D , Künecke U , Wellmann P J 2006 *Phys . Stat . Sol . (C)* **33** 567
- [13] Nakamura D , Yamaguchia S , Gunjishimaa I , Hirosea Y , Kimoto T 2007 *J . Crystal Growth* **304** 57

The relation between Green-band luminescence of 4H-SiC homoepitaxial layer and defects *

Jia Ren-Xu[†] Zhang Yi-Men Zhang Yu-Ming Guo Hui Luan Su-Zhen

(Key Laboratory of Ministry of Education for Wide Band-Gap Semiconductor Materials and Devices ,

School of Microelectronics , Xidian University , Xi 'an 710071 , China)

(Received 24 January 2008 ; revised manuscript received 29 February 2008)

Abstract

The Green-band luminescence (GL) from an Al-doped 4H-SiC Homoepitaxial layer prepared by using chemical vapur deposition(CVD) has been observed and studied. The deep pattern obtained by SEM and the buffer layer can be found in the interface between SiC substrate and epilayer. The deep profiles of Si atom in 4H-SiC epilayers obtained by using the secondary ion mass spectrometry(SIMS) and the X-ray photoelectron spectroscopy(XPS) show the relative distribution of Si and C. The results strongly suggest that the vacancy of C and the extended defects(point defects , threading dislocations , et al) from buffer layer are responsible for the GL emission. The full width at half maximum(FWHW) of GL indicates the distributions of V_C and its complex defects. The quality of crystals and the distribution of defects in epitaxial layers can be characterized by the intensity and the wavelength of GL obtained from samples at room temperature .

Keywords : Green-band luminescence , 4H-SiC homoepitaxial layers , crystal defect

PACC : 7155E , 7855C

* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 51327020202) and the Xi 'an Applied Materials Innovation Fund , China (Grant No. XA-AM-200704).

† E-mail : rxjia@mail.xidian.edu.cn