

Термодесорбция кремния с текстурированных лент тантала

© В.Н. Агеев, Е.Ю. Афанасьева, Н.Д. Потехина, А.Ю. Потехин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Поступила в Редакцию 12 мая 1999 г.)

Изучалось взаимодействие Si с Ta методами оже-спектроскопии и температурно-программируемой десорбции (ТПД). Показано, что при монослойном покрытии адатомы Si начинают проникать в объем подложки при $T \geq 1400$ К. Форма спектра и кривые отжига могут быть объяснены влиянием латерального отталкивания Si-Si в адслое не только на десорбцию, но и на уход Si в объем. Из анализа экспериментальных данных были определены некоторые соотношения между кинетическими параметрами. Их использование в численном расчете на основе ранее предложенной модели позволило определить (путем сравнения расчета с опытом) кинетические параметры всех процессов взаимодействия Si с подложкой из Ta при ТПД (десорбция, уход в объем, диффузия и выхода Si на поверхность). Показано, что удовлетворительное описание эксперимента получается только в предположении, что диффузия в конце ТПД после достижения максимума происходит лишь в пределах тонкого слоя вблизи поверхности, поэтому атомы Si быстрее выходят на поверхность и десорбируются, чем диффундируют в объем. Это означает, что слой вблизи поверхности при высоких температурах во время ТПД имеет нарушенную структуру по сравнению с начальной структурой Ta.

Работа выполнена в рамках программы "Атомные поверхностные структуры" (проект № 4.5.99).

Контакты "тугоплавкий металл-кремний" являются перспективными элементами высокотемпературной микроэлектроники. Однако процессы формирования этих контактов еще недостаточно изучены. Обычно с этой целью изучается система: полупроводник с нанесенным на него слоем металла [1]. В нашей лаборатории исследуются системы из металла с нанесенным на него слоем полупроводника. Это позволяет выявить новые аспекты процессов формирования приповерхностных слоев в области контакта. Данная работа продолжает серию работ, выполненных авторами по изучению взаимодействия Si с тугоплавкими металлами W, Ir, Nb, Ta [2–8] методами оже-электронной спектроскопии и температурно-программируемой десорбции (ТПД). Взаимодействие Si с Ta изучалось в работе [9] методом фотоэлектронной спектроскопии, а диффузия кремния в тантал и силицидообразование изучены с помощью рентгеновского анализа в работе [10].

В настоящей работе измерены спектры ТПД, а также оже-сигналы и полное количество Si, оставшегося в подложке после отжига танталовой ленты с монослоем кремния на поверхности. Эти данные сравниваются с результатами расчета модельной системы, рассмотренной в работах [11,12], где учтены процессы проникновения адатомов в объем металла, их диффузия в объеме и выход на поверхность при ТПД и во время отжига. Сравнение модельного расчета с результатами измерений позволяет определить константы скоростей всех протекающих в системе процессов, а также уточнить их физический смысл.

1. Методы исследования

Измерения проводились методом ТПД с регистрацией продуктов десорбции времяпролетным масс-спектрометром. Давление остаточных газов в приборе составляло 10^{-10} Торр. Абсорбентом служила

текстурированная танталовая лента с преимущественным выходом на поверхность грани (100) с размером $0.01 \times 1.5 \times 30$ mm, расположенная в зоне прямой видимости источника ионов масс-спектрометра. Очистку ленты от углерода проводили по стандартной методике путем отжига в кислороде с последующим температурным прогревом.

Кремний напылялся из штабиков размерами $1 \times 1 \times 30$ mm. Штабики укрепляли параллельно ленте из Ta и нагревали постоянным током. Температуру ленты определяли по зависимости сопротивления от температуры. Градуировку этой зависимости осуществляли с помощью оптического микропирометра. Ленту Ta нагревали пропусканием постоянного тока. Зависимость температуры ленты от времени в процессе "вспышки" была линейной. Поток атомов Si регистрировали по току ионов Si^+ , которому в масс-спектре соответствовала линия 28. Поток атомов Si на ленту калибровали методом "кварцевых весов".

Опыты проводили следующим образом. Ленту Ta прогревали при 2600 К в течение нескольких секунд. Затем температуру ленты понижали до комнатной, напыляли Si в течение различных интервалов времени и производили "вспышку". Отжиг пленки с монослоем кремния, нанесенным при $T = 300$ К, проводили в нескольких температурных точках T_i в интервале температур 1300–1800 К в течение 1 min. Предварительно было установлено отсутствие десорбции Si с обратной стороны ленты как во время "вспышки", так и при отжиге ленты с нанесенным на одну сторону кремнием.

2. Результаты измерений

На рис. 1,а представлены спектры ТПД для скорости нагрева $\beta = 200$ К · с⁻¹ и различных начальных степеней покрытия θ_0 Ta(100) кремнием при $\theta_0 \leq 1$.

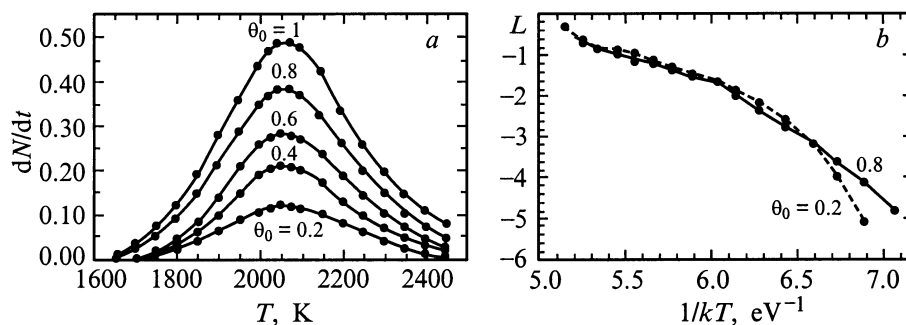


Рис. 1. Измеренные спектры ТПД Si/Ta для начальных покрытий Si $\theta_0 = 0.2; 0.4; 0.6; 0.8; 1.0$ (a); зависимость функции $L = \ln(N^{-1}dN/dT)$ от $(kT)^{-1}$ для $\theta_0 = 0.2$ (штриховая линия) и 0.8 (сплошная линия) (b).

Для всех θ_0 на рис. 1, a наблюдается один пик ТПД. Положение максимума и полуширина пика не меняются с ростом θ_0 , что обычно характерно для одноатомной десорбции без латеральных взаимодействий в адслое и без диффузии адчастиц в объем. Тогда кривые ТПД описываются уравнением Аррениуса с первым порядком десорбции. В нашем случае однако зависимость $L(1/kT) = \ln(N^{-1}dN/dT)$, график которой для двух θ_0 приведен на рис. 1, b, не аппроксимируется прямой линией, а значит, не описывается уравнением Аррениуса. Наклон начальных прямых участков на этом графике (для $T \lesssim 1800$ К, т.е. $1/kT \gtrsim 6.4$ eV $^{-1}$) уменьшается с ростом покрытия от $E^* \simeq 5.4 \pm 0.2$ eV при $\theta_0 = 0.2$ до $E^* \simeq 3.5 \pm 0.2$ eV при $\theta_0 = 0.8$. При более высоких температурах зависимость кривых $L(1/kT)$ от θ_0 исчезает, а их наклон уменьшается по мере роста температуры до 2200 К.

Поскольку спектры ТПД для $\theta_0 \leq 1$ не описываются уравнением Аррениуса с первым порядком десорбции, то для их объяснения необходимо привлечь другие процессы, например, возможность диффузии Si в объем танталовой ленты при ТПД. Для проверки такой возможности мы изучали зависимость оже-сигнала кремния от температуры отжига T_i монослойной пленки Si на Ta. На рис. 2 через экспериментальные точки пунктиром проведены кривые отжига, дающие зависимость интенсивности оже-сигнала (кривая 1) и полного количества кремния, оставшегося в системе после отжига (кривая 2). Сплошная кривая дается теоретической аппроксимацией, обсуждаемой в разделе 3.

Уменьшение оже-сигнала $I_A(T)$ (кривая 1), пропорционального количеству кремния в приповерхностных слоях, происходит с ростом T_i , как за счет десорбции Si во время отжига, так и за счет его диффузии в объем тантала. Уменьшение $M(T_i)$ — полного количества Si, оставшегося в системе, — происходит только за счет десорбции во время отжига и измеряется методом ТПД. Из сравнения кривых 1, 2 на рис. 2 видно, что уменьшение количества Si в приповерхностной области происходит раньше (при $T_i \geq 1400$ К), чем начинается десорбция и спад $M(T_i)$ (при $T_i \geq 1500$ К). Это означает, что в диапазоне $1400 \leq T_i \leq 1500$ К существует только

диффузия Si в объем подложки, а при $T_i \geq 1500$ К одновременно с диффузией Si в объеме происходит и его десорбция с поверхности Ta. До температуры $T_i \leq 1400$ К монослой Si на Ta устойчив по отношению к обоим процессам.

На рис. 3 показаны спектры ТПД для больших покрытий, $\theta_0 > 1$. Начальные участки ТПД спектров для $\theta_0 = 1.2$ и 1.6 (кривые 1, 2) отличаются от таковых для $\theta_0 > 2$ (кривые 3–5). При дальнейшем увеличении покрытия фронты термодесорбционных кривых 3–5 совпадают, а максимумы смещаются с ростом θ_0 в область высоких температур (ВТ). Это свидетельствует о нулевом порядке десорбции, характерном для десорбции из толстого слоя адсорбата. Действительно, график $\ln(N^{-1}dN/dT)$ в зависимости от $(kT)^{-1}$ в этом случае удовлетворительно изображается прямой, наклон которой дает $E^* = 5.4 \pm 0.2$ eV. Известно, что при напылении Si на Ta в диапазоне температур $1300 < T \leq 1600$ К до начальных концентраций $\theta_0 < 2$ наблюдается накопление кремния в приповерхностной области с последующим образованием в этой области силицида Ta_5Si_3 [8]. Если же концентрация напыленного Si превысит $\theta_0 \simeq 2$, то в приповерхностной области происходит структурный фазовый переход от Ta_5Si_3 к

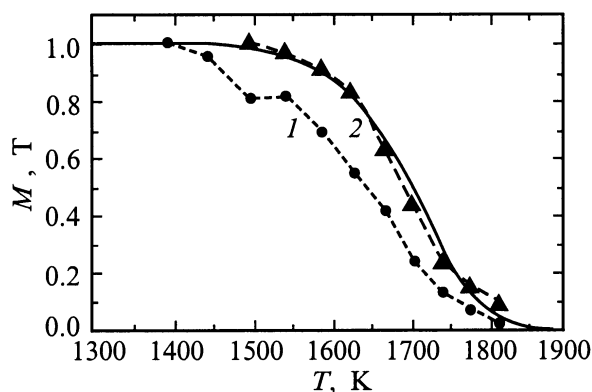


Рис. 2. Изменение оже-сигнала (1) и полного количества $M(T)$ Si (2) в пластине Ta после отжига в течение 60 с в зависимости от температуры отжига.

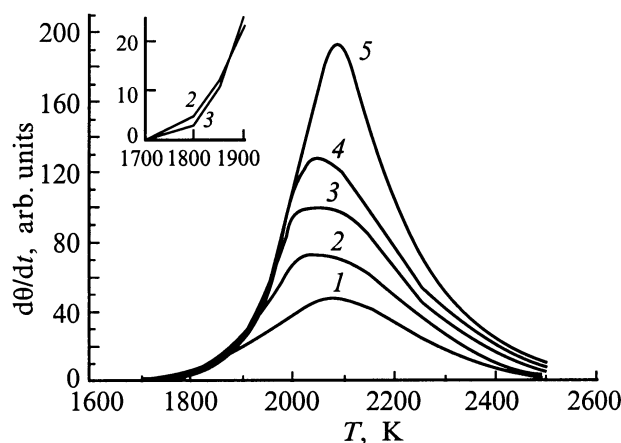


Рис. 3. Спектры ТПД Si/Ta при больших степенях напыления Si: θ_0 : 1 — 1.2; 2 — 1.6; 3 — 2.0; 4 — 2.4; 5 — 3.2.

Ta₄Si. Поэтому различия в начальных участках ТПД спектров для $\theta_0 < 2$ и $\theta_0 > 2$, по-видимому, связаны с десорбцией Si из различных силицидов: Ta₅Si₃ и Ta₄Si. При этом резко увеличивается скорость растворения Si сквозь слой силицида [8].

При $\theta_0 \geq 2$ фронты спектров ТПД совпадают, и максимум смещается в область высоких температур. Независимость скорости десорбции от покрытия связана здесь, вероятно, с десорбцией Si из силицида Ta₄Si. Энергия активации десорбции, полученная из зависимости $L(1/kT)$, совпадает при этом с энергией десорбции при малых θ_0 , $E_d = 5.4 \pm 0.2$ eV, что указывает на наличие небольшой поверхностной концентрации атомов Si в процессе испарения силицида.

Следует отметить, что если температура T_{ads} , при которой производилось напыление Si на Ta, меньше 1300 K, то форма спектров ТПД в отличие от Si на W при $\theta_0 > 1$ [4] не зависит от T_{ads} как при $\theta_0 \leq 1$, так и при $\theta_0 > 1$, хотя проникновение Si в Ta при $\theta_0 > 1$ начинается уже при $T > 700$ K [8]. Это означает что окончательный профиль концентрации Si в объеме Ta устанавливается за время "вспышки".

3. Сравнение результатов измерений с модельными расчетами спектров ТПД

Из приведенных на рис. 1–3 результатов следует, что процесс ТПД атомов Si с поверхности Ta (100) сопровождается проникновением Si в объем подложки, которое начинается раньше, чем десорбция из адслоя. Уменьшение наклона начальных участков графиков $L(1/kT)$ на рис. 1, b при увеличении θ_0 свидетельствует об отталкивательном взаимодействии между атомами Si на поверхности Ta (100), аналогичном латеральному взаимодействию Si–Si на поверхности W (100) [4].

Таким образом, при описании спектров ТПД из субмонослойных пленок кремния на поверхности Ta (100) необходимо учитывать как процессы диффузии Si в объем подложки с его обратным выходом на поверхность во время "вспышки", так и латеральное взаимодействие в адслое. Расчет модельной системы для описания спектров ТПД в этих условиях был выполнен в работах [11,12]. Там рассматривалась симметричная пластина толщиной $2l$, на обе стороны которой нанесен слой адсорбата с начальным покрытием θ_0 . Предполагалось, что процессы диффузии и десорбции начинаются лишь при $T(t) \geq T_0$. В начальный момент объем свободен от частиц. В модели (рис. 4) выделен первый подповерхностный слой, который служит границей остального объема, рассматриваемого как континуум. Движение частиц в объеме характеризуется коэффициентом диффузии $D = D_0 \exp(-E_m/kT)$. В работе [11] записана система уравнений для численного решения задачи об изменениях концентрации частиц в адслое, приповерхностном слое и в объеме во время ТПД при

$$T(t) = T_0 + \beta t. \quad (1)$$

Рассматривались случаи с различным соотношением между константами скоростей десорбции k_d , перехода из адслоя в приповерхностный слой k_1 и обратно k_2 и коэффициентом диффузии $D(T)$.

Позже аналогичная задача была сформулирована в работе [13], где диффузия в объем учитывалась при напылении адсорбата. Было показано, что чем медленнее идет напыление, тем выше в спектре диффузионный максимум в области ВТ. В наших работах предполагалось, что начальное покрытие задано и влияние диффузии изучалось лишь во время ТПД. Но в отличие от [13] в работе [11] учтено изменение концентрации в подповерхностном слое на границе объема с адслоем вместо предположения о квазистационарности потока

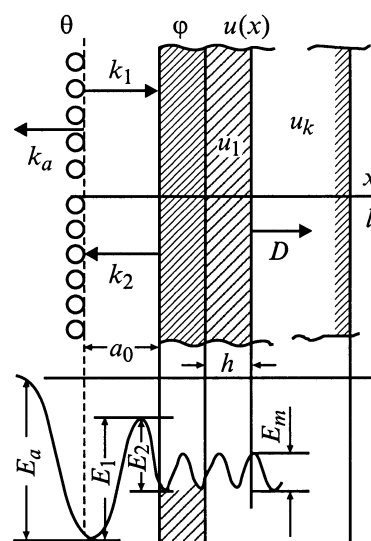


Рис. 4. Схематическая модель изучаемой системы.

частиц на границе. Одной из целей нашей работы [11] как раз и было определение условий формирования квазистационарного потока на границе объемной среды. Было показано, что это происходит лишь в конце процесса ТПД, после достижения максимума в спектре. Кроме того, в работе [12] в отличие от [13] было учтено влияние латеральных взаимодействий в адслое на спектры ТПД.

При отсутствии латеральных взаимодействий константы скоростей всех процессов подчиняются уравнению Аррениуса

$$k_i(T) = k_i^0 \exp(-E_i/kT), \quad (2)$$

где k_i^0 — предэкспоненты, E_i — энергии активации соответствующего процесса. Латеральные взаимодействия в адслое приводят к зависимости величин k_d и k_1 от покрытия $\theta(t)$. Мы брали эту зависимость из теории решеточного газа [14,15]. Спектр ТПД определяется потоком десорбирующихся частиц

$$J(t) = -dN/dt = N_s k_d(T(t)) \theta(t), \quad (3)$$

(где $N(t) = N_s \theta(t)$ — полное число частиц в половине пластины, N_s — число мест адсорбции на 1 cm^2), и может иметь один, два и три максимума [11,12]. Один пик в спектре при наличии латерального отталкивания в адслое может остаться лишь в том случае, когда отталкивание влияет не только на скорость десорбции, но и на уход частиц в объем, который при этом начинается раньше, чем десорбция.

Для предварительной оценки пределов изменения параметров, входящих в численный расчет, использовались следующие результаты.

1) Наклон графика $L(1/kT) = \ln(N^{-1} dN/dt)$ (рис. 1, б) при малых степенях покрытия $\theta_0 \rightarrow 0$ определяет величину энергии активации десорбции,

$$E_d \simeq 5.4 \pm 0.2 \text{ eV}. \quad (4)$$

2) Изменение наклона графика $L(1/kT)$ с ростом θ_0 дает оценку энергии w латерального взаимодействия из соотношения

$$E_i(\theta) \simeq E_i(0) - z\theta w, \quad (5)$$

где z — число ближайших соседей в адслое, E_i — это E_d или E_1 .

Для определения w используем $E_d(0)$ из (4) и $E_d(1) \simeq 4.5 \text{ eV}$. Последнюю величину мы взяли близкой к теплоте сублимации Si, так как определение $E_d(1)$ из наклона графиков $L(1/kT)$ не будет корректным, поскольку ТПД происходит, как показано выше, после частичного истощения адслоя за счет диффузии в объем. Если бы десорбция происходила при $\theta \simeq 1$, то латеральное отталкивание в адслое должно было бы приводить к двум пикам в спектре ТПД [14,15], в то время как в случае Si/Ta проявляется только высокоэнергетический пик, соответствующий малым покрытиям. Тогда из уравнения (5) при $z = 4$ получим оценку

$$w \simeq 0.25 \pm 0.05 \text{ eV}. \quad (6)$$

3) Предэкспоненты десорбции оцениваем из положения максимума спектра ТПД, $T_m \simeq 2060 \text{ K}$ в соответствии с уравнением Редхеда [16], полученным без учета диффузии в объем

$$E_d/(kT_m) \simeq \ln(k_d^0 T_m / \beta) - 3.64. \quad (7)$$

Здесь использованы соотношения (1) и (2) для зависимостей $k_d(T)$ и $T(t)$.

4) Разница температур начала ухода адатомов Si в Ta ($T_1 = 1400 \text{ K}$) и начала десорбции ($T_2 = 1500 \text{ K}$) дает нижнюю границу для разности E_d и E_1 на основе соотношения $k_1(1400 \text{ K}) \simeq k_d(1500 \text{ K})$. Используя закон Аррениуса (2) и подставляя в него зависимость энергий активации E_d и E_1 от покрытия (5), а также учитывая, что при $T_2 = 1500 \text{ K}$ в объем ушло примерно $0.1\theta_0$ (рис. 3), получим уравнение

$$E_1 \simeq (E_d - 0.9\theta_0 zw) \frac{T_1}{T_2} + \theta_0 zw - kT_1 \ln(k_d^0/k_1^0), \quad (8)$$

из которого найдем, что при $k_d^0/k_1^0 \simeq (1-10)$; $w = 0.3$, $z = 4$, $\theta_0 = 1$

$$\delta E = E_d - E_1 \geq (0.4-0.8) \text{ eV}. \quad (9)$$

5) Из теории отжига субмонослоя при наличии диффузии в объем [17] следует, что изменение оже-сигнала примесных частиц в поверхностном слое в начальные моменты отжига при $t < k_d^{-1}(T)$ определяется уравнением

$$I_A(t, T) \simeq I_0 \lambda \theta_0 [1 - b(T) \sqrt{t}], \quad (10)$$

$$b(T) = k_1(T) \sqrt{D} / [a_0 k_2(T)],$$

где a_0 — постоянная решетки Ta, λ — глубина проникновения оже-сигнала примеси, который спадает с ростом ее расстояния x от поверхности по закону $I_A(x) = I_0 \exp(-x/\lambda)$, а I_0 — оже-сигнал от монослоя. Из сравнения эксперимента для Si/Ta [7] с выражением (10) в работе [17] получены соотношения

$$E_1 - E_2 \simeq (1.9 - E_m/2) \text{ eV}; \quad k_2^0/k_1^0 \simeq 5, \quad (11)$$

где E_2 — энергия активации обратного выхода частиц из объема на поверхность, а E_m — энергия активации объемной миграции.

При выводе уравнений (10)–(11) не была учтена зависимость от θ в коэффициентах $k_d(\theta, T)$ и $k_1(\theta, T)$. Поэтому оценки (11) являются предварительными и могут измениться при учете этих зависимостей.

6) На эксперименте не наблюдалось выхода частиц на обратную сторону ленты толщиной 0.01 mm . Распределения частиц в объеме, вычисленные при различных коэффициентах диффузии с параметрами, отвечающими условиям (1)–(5), показали, что атомы Si не выходят на обратную сторону ленты ни при отжиге, ни при ТПД, если коэффициент диффузии ограничен неравенством

$$D(T) \geq 10^{-4} \exp(-1.5 \text{ eV}/kT). \quad (12)$$

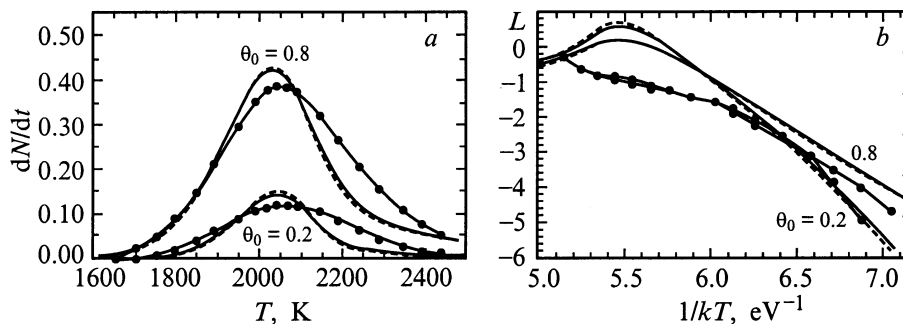


Рис. 5. Результат расчета спектра ТПД (а) и функции $L(1/kT)$ (b) с параметрами I (сплошные кривые) и II (штриховые кривые) из табл. 1 для $l_1 = l = 0.001$ см. Приведены также результаты измерений (точки, соединенные сплошными линиями) для $\Theta_0 = 0.2$; 0.6; 1.0 (а) и $\theta_0 = 0.2$; 0.8 (b).

На основании этих соображений получаем набор исходных параметров, около которых производим добавочные небольшие вариации для более точного описания спектра ТПД (рис. 1) и кривых отжига (рис. 2). Исходный набор кинетических параметров при разных значениях $D(T)$ приведен в табл. 1 (варианты I и II). Энергии активации указаны в eV, а предэкспоненты — в единицах 10^{13} s^{-1} для k_i^0 и в $\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ для D_0 .

Вычисления с этими параметрами для $l = 10^{-3}$ см показывают (рис. 5), что хотя расчет и передает главные особенности спектра, один максимум, положение и полуширина которого почти не меняются с изменением начального покрытия θ_0 , но при этом спектр оказывается несимметричным в отличие от эксперимента, а скорость отжига при ВТ значительно меньше экспериментальной

(табл. 2, $l_1 = l$). Это означает, что в расчете более, чем в 3 раза завышено количество кремния, проникшего в объем и оставшегося в нем после отжига при $T \geq 1700 \text{ K}$, независимо от величины коэффициента диффузии, удовлетворяющего условию (12). Вариации параметров не устраняли этого расхождения с экспериментом. Функция $L(1/kT)$ (рис. 5, b) в расчете перестает расти и понижается при $T \geq T_m$, что, как показано в [11,12], также свидетельствует о завышении роли диффузии в объем для нашей модели по сравнению с экспериментом.

Восстановить симметрию вычисленных спектров можно было лишь введя предположение о резком уменьшении скорости диффузии в объеме за пределами некоторого слоя толщины $l_1 \ll l$ вблизи поверхности. При этом все варианты параметров из табл. 1 дают симметричные спектры, аналогичные показанному на рис. 6, где представлены результаты расчета с параметрами вариантов I и II при $l_1 < l$. Ход функции $L(1/kT)$ (рис. 6, b) также больше похож на ход экспериментальных графиков. Отжиг при ВТ ускоряется, почти устраняя расхождение с экспериментом, как показывает табл. 2. Отметим, что при такой модификации теоретической модели отпадает ограничение (12).

Еще лучше подгонка к эксперименту получена некоторой вариацией констант (вариант III в табл. 1) (рис. 7). Отклонения от условий (11) в этом наборе могут быть следствием приближений, сделанных в работе [17], а также результатом связи между параметрами E_i и k_i^0 , не позволяющей определять их однозначно порознь. Взаимосвязь параметров приводит к возможности описывать эксперимент различными наборами параметров. Однако все найденные нами наборы не очень сильно отличаются друг от друга и для взаимодействия субмонослоя Si с подложкой из Ta параметры ограничены следующими рамками величин (в eV для энергий активации, в 10^{13} s^{-1} для k_i^0):

$$\begin{aligned} E_d &\simeq 5.3-5.5; & k_d^0 &\simeq 5-10; \\ E_1 &\simeq 4.4-4.7; & k_1^0 &\simeq 1-8; \\ E_2 &\simeq 3.0-3.5; & k_2^0 &\simeq 3-7; \\ E_m &\simeq 1.6-2.1; & D_0 &\simeq 10^{-4}-10^{-3} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}. \end{aligned} \quad (13)$$

Таблица 1. Варианты набора параметров, использованных в расчете

	I		II		III	
	E_i	k_i^0	E_i	k_i^0	E_i	k_i^0
k_d	5.4	5	5.5	8	5.3	7
K_1	4.6	1	4.7	1	4.4	5
k_2	3.4	5	3.5	5	3.0	7
D	$2.1 \cdot 10^{-3}$		$1.8 \cdot 10^{-4}$		$1.6 \cdot 10^{-4}$	
l_1	$0.15l$		$0.12l$		$0.25l$	

Таблица 2. Доля Si, оставшегося в подложке после отжига в течение 60 с при разных T_i (результаты измерений и вычислений с наборами параметров I и III из табл. 1)

$T_i, \text{ K}$	Эксперимент	I		III
		$l_1 = l$	$l_1 = 0.15l$	$l_1 = 0.25l$
1400	1.0	0.994	0.99	1.0
1500	1.0	0.988	0.98	0.98
1600	0.80–0.89	0.92	0.90	0.88
1700	0.38–0.46	0.72	0.60	0.52
1800	0.10	0.36	0.13	0.06

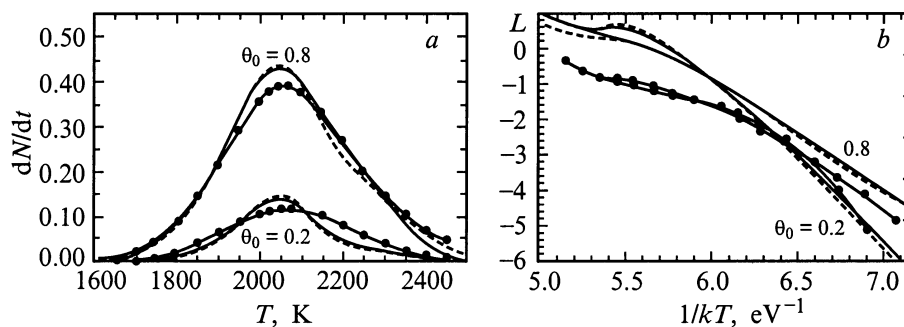


Рис. 6. То же, что на рис. 5, но при $l_1 < l$ из табл. 1.

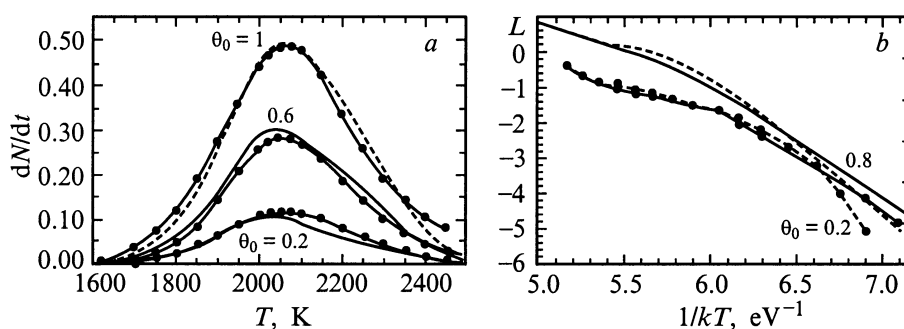


Рис. 7. Вычисленные спектры ТПД (а) и функция $L(1/kT)$ при наборе параметров III из табл. 1 для $\theta_0 = 0.2; 0.6; 1.0$ (а) и $\theta_0 = 0.2; 0.8$ (б). Результаты измерений даны точками, соединенными сплошными линиями.

При этом в нашей модели предполагается, что в объеме пластины скорость диффузии падает до нуля за пределами тонкого слоя вблизи поверхности. Для реальной системы это означает, что скорость диффузии примесных частиц в объеме зависит от концентрации примеси или от расстояния до поверхности. Мы моделировали эту зависимость ступенчатым спадом $D(T)$ до 0 при $x \geq l_1 = (0.12-0.25)l$, где l — толщина пластины из тантала. Грубость этой модели отчасти обуславливает неточное описание вычисляемых зависимостей dN/dt и $L(1/kT)$ при разных θ_0 . В частности, ступенчатый спад коэффициента диффузии приводит к более резкому спаду ВТ ветви спектра по сравнению с экспериментом. Ход экспериментального графика $L(1/kT)$ также ближе к модели со ступенчатой зависимостью коэффициента диффузии $D(x)$, чем к модели без такой зависимости (рис. 5, 6). На рис. 7 наклоны различных участков графика $L(1/kT)$, определяющие эффективные энергии активации E_i , удовлетворительно согласуются с экспериментом. Остающиеся количественные расхождения могут быть связаны с неточностью как модели, так и измерений. Данные по отжигу, рассчитанные по данной модели (последний столбец табл. 2 и сплошная кривая на рис. 2), также неплохо согласуются с экспериментом.

Проведенные вычисления показали, что совокупность требований (4)–(12) определяет довольно узкие рамки

изменения параметров скоростей реакций, представленные соотношениями (13).

Таким образом, в настоящей работе показано, что во время температурной "вспышки" кремний из субмонослоя раньше проникает в объем подложки (при $T \geq 1400$ K), чем десорбируется (при $T \geq 1500$ K). Это объясняет, почему в спектре ТПД кремния с поверхности тантала имеется лишь один максимум, несмотря на существование латерального отталкивания в адслое.

Из сравнения расчета с экспериментом следует, что наблюдаемая колоколообразная форма спектра почти без диффузионного "хвоста", возможна лишь при выделении вблизи поверхности некоторого слоя с повышенной скоростью диффузии в нем по сравнению с остальным объектом. Это может быть связано с образованием слоя силицида при $T \geq 1600$ K, сквозь который и осуществляется ускоренная диффузия в объем, а также более быстрый выход Si на поверхность через слой разрушающегося силицида, чем проникновение далее в глубь чистого Ta. Поэтому модель с "отражением" диффундирующих частиц от границы некоторого слоя вблизи поверхности лучше передает форму спектра ТПД и скорость отжига, чем с постоянным коэффициентом диффузии по всей толщине ленты.

Определены приближенные значения энергий активации и предэкспонент в скоростях реакций всех процессов взаимодействия адатомов Si с подложкой из Ta.

Список литературы

- [1] G. Ross. Surf. Rep. **7**, 1 (1987).
- [2] В.Н. Агеев, Е.Ю. Афанасьева, Н.Р. Галль, С.Н. Михайлов, Е.В. Рутков, А.Я. Тонтегоде. Поверхность **5**, 7 (1987).
- [3] В.Н. Агеев, Е.Ю. Афанасьева, Н.Р. Галль, С.Н. Михайлов, Е.В. Рутков, А.Я. Тонтегоде. Письма в ЖТФ **12**, 9, 565 (1986).
- [4] В.Н. Агеев, Е.Ю. Афанасьева. Поверхность **7**, 30 (1987).
- [5] Е.Ю. Афанасьева, Н.Д. Потехина, С.М. Соловьев. ФТТ **37**, 2, 463 (1995).
- [6] В.Н. Агеев, Е.Ю. Афанасьева, С.М. Соловьев, А.К. Григорьев. ФТТ **35**, 2, 481 (1993).
- [7] N.R. Gall, E.V. Ryt'kov, A.Ya. Tontegode, M.M. Usufov. Phys. Low-Dim. Struct. **4/5**, 75 (1996).
- [8] В.Н. Агеев, Е.Ю. Афанасьева. ФТТ **39**, 8, 1484 (1997).
- [9] T.A. Nguyen Tau, V. Azizan, J. Derrien. Surf. Sci. **189/190**, 339 (1987).
- [10] G.J. Campisi, A.J. Bevolo, H.R. Shanks, H.A. Schmidt. J. Appl. Phys. **53**, 1714 (1982).
- [11] В.Н. Агеев, А.Ю. Потехин, Н.Д. Потехина. Поверхность **1**, 31 (1987).
- [12] В.Н. Агеев, А.Ю. Потехин, Н.Д. Потехина. Поверхность **1**, 5 (1991).
- [13] M. Mavrikakis, J.M. Schwank, Y.L. Gland. Surf. Sci. **355**, 385 (1996).
- [14] D.L. Adams. Surf. Sci. **42**, 12 (1974).
- [15] V.P. Zhdanov. Elementary Physical Chemical Processes on Solids Surfaces. Plenum, N. Y. (1991).
- [16] P.A. Redhead. Vacuum **12**, 2, 203 (1962).
- [17] Н.Д. Потехина. ФТТ (1999).