

07

Релаксация механических напряжений в эпитаксиальных пленках кубического карбида кремния на кремниевых подложках с буферным пористым слоем

© А.С. Гусев, Н.И. Каргин, С.М. Рындя, Г.К. Сафаралиев, Н.В. Сиглова, М.О. Смирнова, И.О. Соломатин, А.О. Султанов, А.А. Тимофеев

Национальный исследовательский ядерный университет „МИФИ“,
115409 Москва, Россия
e-mail: karabi86@mail.ru

Поступило в Редакцию 30 декабря 2020 г.
В окончательной редакции 19 января 2021 г.
Принято к публикации 21 января 2021 г.

Результаты работы количественно и качественно освещают процессы релаксации напряжений несоответствия, возникающих при эпитаксии кубического карбида кремния на кремнии. Проведен анализ распределений механических напряжений в гетероструктурах 3C–SiC/Si и 3C–SiC/*por*-Si. Показана существенная роль пористого буферного слоя в уменьшении величины напряжений несоответствия. Данные теоретического исследования подтверждены экспериментальными значениями остаточных напряжений в образцах 3C–SiC/Si и 3C–SiC/*por*-Si.

Ключевые слова: карбид кремния, пористый кремний, остаточные напряжения, дислокации несоответствия.

DOI: 10.21883/JTF.2021.06.50870.353-20

Введение

Наиболее важной особенностью 3C–SiC является возможность его синтеза на подложках Si большого диаметра, что позволяет рассматривать SiC как привлекательный материал для приборов силовой электроники и фотоники. Однако синтез пленок 3C–SiC приборного качества на монокристаллическом кремнии ограничен фактором рассогласования по параметрам решеток (19.7%) и коэффициентам теплового расширения (8%) [1]. Напряжения несоответствия релаксируют до остаточных значений путем возникновения и перемещения дислокаций. Вследствие этого нарушается структура пленок 3C–SiC, что влияет на их электрофизические свойства. В ряде работ [2–5] авторами получены значения остаточных напряжений монокристаллических пленок 3C–SiC, синтезированных методом эпитаксии из газовой фазы (CVD) на подложках Si. Значения измеренных остаточных напряжений лежат в достаточно широком диапазоне от 215 до 870 МПа и не могут дать однозначной картины процессов упругой деформации гетероструктур 3C–SiC/Si.

С целью устранения дефектов несоответствия и улучшения кристаллического совершенства растущего слоя при гетероэпитаксиальном выращивании 3C–SiC необходимо использовать буферные слои.

Эпитаксия карбида кремния на подложках Si с поверхностным пористым слоем (*por*-Si) позволяет существенно снизить внутренние напряжения несоответствия в синтезируемых пленках [6–8]. Тем не менее в настоящее время в специальной научной литературе отсутствуют научные исследования процессов релаксации

внутренних напряжений гетероэпитаксиальных пленок 3C–SiC буферным слоем пористого кремния. В настоящей работе приведены результаты исследований распределений механических напряжений в гетероструктурах 3C–SiC/Si и 3C–SiC/*por*-Si.

1. Некоторые особенности упругих свойств кристаллической структуры 3C–SiC

Закон Гука с переходом от тензорной индексации на матричную для монокристаллов кубического политипа имеет вид:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{32} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{21} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{32} \\ 2\varepsilon_{31} \\ 2\varepsilon_{21} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где c_{ij} — константы жесткости кристалла. Величины c_{ij} образуют тензор четвертого ранга. Тензор, составленный из коэффициентов c_{ij} , называют тензором упругой жесткости или просто тензором упругости. Различают нормальные ($i = j$) и сдвиговые ($i \neq j$) компоненты тензора напряжений в кубической решетке. Первый индекс компонент напряжений указывает направление компоненты в системе координат, второй — направление нормали площадки в этой же системе координат. Из принципа Неймана следует, что число независимых компонентов упругости можно свести к трем для случая

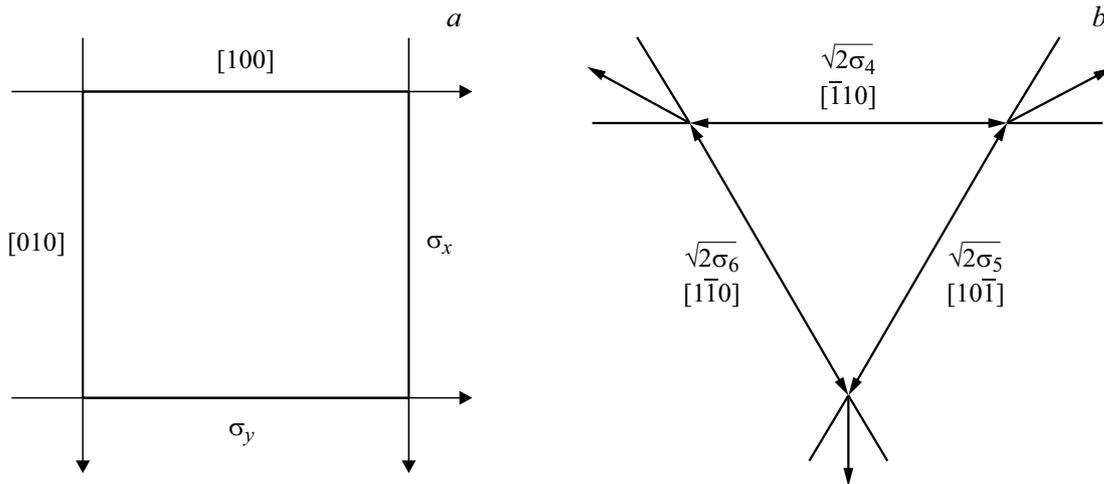


Рис. 1. Схема, иллюстрирующая приложение сил растяжения кубической решетки: *a* — в плоскости (001); *b* — в плоскости (111).

твердого тела с кубическим типом решетки. Симметрия кубической решетки обуславливает равенство коэффициентов вдоль пространственных осей и диагоналей: $c_{11} = c_{22} = c_{33}$; $c_{44} = c_{55} = c_{66}$; $c_{12} = c_{23} = c_{13}$. Коэффициенты, соответствующие вращательным компонентам сил, не деформирующим кубическую решетку, равны нулю.

При деформации растяжения вдоль направлений [100] и [010] (рис. 1, *a*) для плоскостей {001} выражение (1) можно представить как систему линейных уравнений:

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= \sigma_x = c_{11}\epsilon_{11} + c_{12}\epsilon_{22} + c_{12}\epsilon_{33}, \\ \sigma_{22} &= \sigma_y = c_{12}\epsilon_{11} + c_{11}\epsilon_{22} + c_{12}\epsilon_{33}, \\ \sigma_{33} &= \sigma_z = c_{12}\epsilon_{11} + c_{12}\epsilon_{22} + c_{11}\epsilon_{33}. \end{aligned} \quad (2a)$$

Поскольку $\epsilon_{11} = \epsilon_{22} = \epsilon$, а воздействие по оси *z* отсутствует ($\sigma_z = 0$), то для растянутого слоя 3C–SiC получаем

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \sigma_y = M_{100}\epsilon, \\ \epsilon_{33} &= \epsilon_z = -\frac{2c_{12}}{C_{11}}\epsilon, \\ M_{[100]} &= c_{11} + c_{12} - 2c_{12}^2/c_{11}, \end{aligned} \quad (2b)$$

где σ_x и σ_y — напряжения, соответствующие в системе координат, осям *x* и *y* соответственно, $\epsilon = 0.24541$ — деформация вдоль осей координат *x* и *y*, ϵ_z — деформация по оси *z*, $M_{[100]}$ — биаксиальный модуль упругости, [GPa]. Карбиду кремния кубического поли-типа соответствуют константы жесткости $c_{11} = 290$ GPa, $c_{12} = 235$ GPa и $c_{44} = 55$ GPa [9–11].

В случае деформации вдоль направлений $[1\bar{1}0]$, $[\bar{1}10]$ и $[10\bar{1}]$ для плоскостей {111} закон Гука (1) сводится к системе уравнений

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= c_{11}\epsilon_{11} + c_{12}\epsilon_{22} + c_{12}\epsilon_{33}, \\ \sigma_{22} &= c_{12}\epsilon_{11} + c_{11}\epsilon_{22} + c_{12}\epsilon_{33}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{33} &= c_{12}\epsilon_{11} + c_{12}\epsilon_{22} + c_{11}\epsilon_{33}, \\ \sigma_{32} &= 2c_{44}\epsilon_{32}, \\ \sigma_{31} &= 2c_{44}\epsilon_{31}, \\ \sigma_{21} &= 2c_{44}\epsilon_{21}. \end{aligned} \quad (2c)$$

В силу эквивалентности направлений $[1\bar{1}0]$, $[\bar{1}10]$ и $[10\bar{1}]$ для кубической решетки (рис. 1, *b*), связь напряжения растяжения и деформации решетки можно привести к виду:

$$\begin{aligned} \sigma_{[\bar{1}10]} &= M_{111}\epsilon_{32}, \\ M_{[\bar{1}10]} &= 2\sqrt{2}c_{44}, \end{aligned} \quad (2d)$$

где $\epsilon_{32} = 0.24554$.

Также на этапе охлаждения гетероструктуры 3C–SiC/Si до комнатной температуры пленка карбида кремния „стягивает“ подложку кремния, что приводит к деформации изгиба. Согласно теории упругости, деформация изгиба характеризуется радиусом кривизны *R*. Наличие в гетероструктуре 3C–SiC/Si дислокаций, пор и других дефектов структуры релаксирует напряжения несоответствия, что приводит к увеличению значения радиуса кривизны.

2. Расчет значений остаточных напряжений по спектрам комбинационного рассеяния

Методом эпитаксии из газовой фазы (CVD) был получен экспериментальный ряд гетероструктур 3C–SiC/Si и 3C–SiC/*por*-Si. Синтез пленок 3C–SiC проводился в системах „H₂–SiH₄–C₂H₄“ и „H₂–C₂H₄“ при температуре 1100–1300°С. Использовались подложки монокристаллического кремния с ориентацией поверхности (111) и (100), а также образцы, содержащие

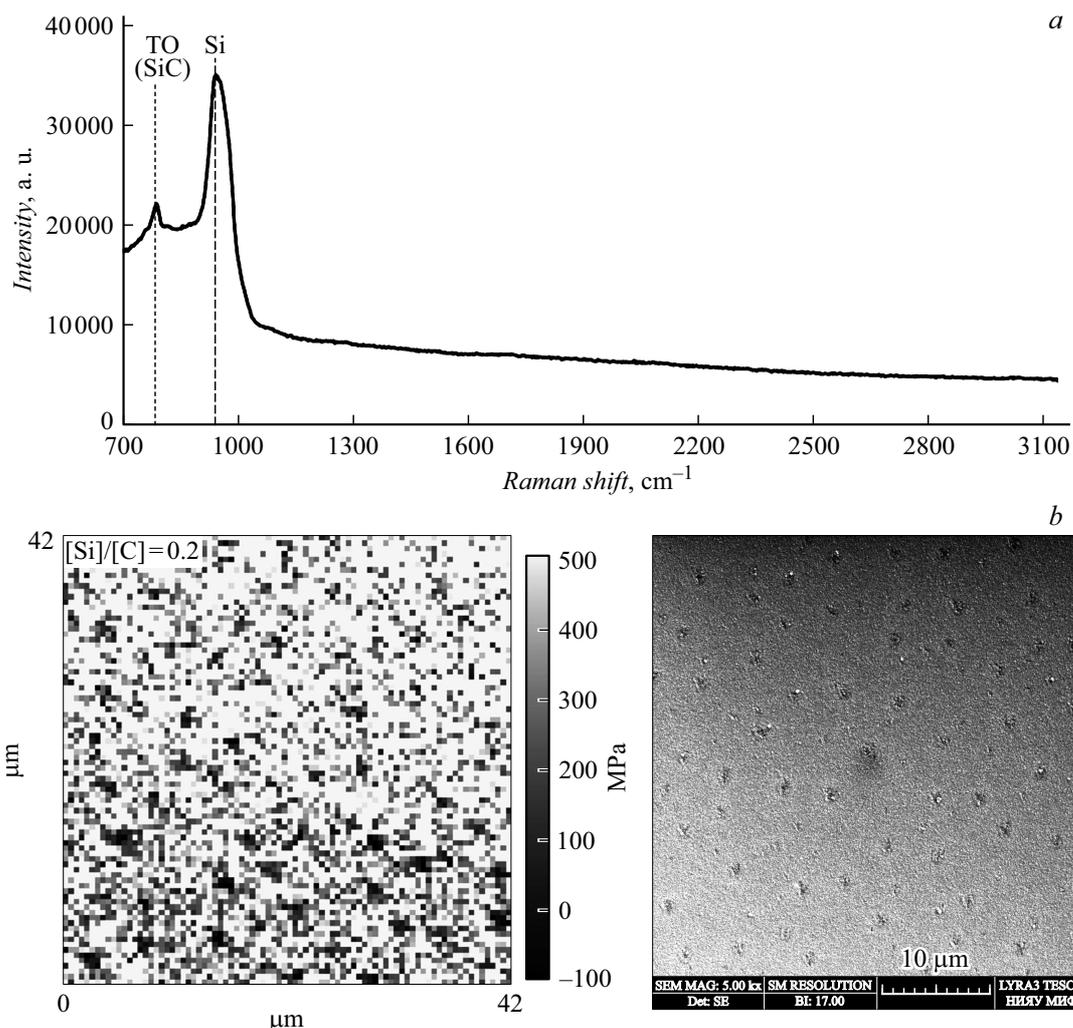


Рис. 2. *a* — пример рамановского спектра экспериментальных гетероструктур 3C-SiC/Si; *b* — сравнение карт распределения остаточных напряжений и РЭМ изображений поверхности экспериментальных образцов 3C-SiC/Si. Ориентация поверхности подложек — (111). Размер одного пикселя — $0.5 \mu\text{m}$.

слой мезопористого кремния. Мезопористые слои получены методом анодирования на подложках кремния с ориентацией поверхности (100). Величина остаточных напряжений в экспериментальных образцах оценивалась по смещению в длинноволновую область пиков 3C-SiC в спектрах комбинационного (рамановского) рассеяния. Смещение оптического (ТО) пика пленки карбида кремния ω_{TO} от значения $\omega = 796.5 \pm 0.3 \text{ cm}^{-1}$ объясняется деформацией несоответствия. Остаточное механическое напряжение пленок 3C-SiC определялось с помощью выражения [12]:

$$\omega_{\text{TO}} (\text{cm}^{-1}) = (796.5 \pm 0.3) + (3730 \pm 30) \frac{\Delta a}{a_0}, \quad (3)$$

где $\Delta a/a_0$ — деформация кристаллической решетки 3C-SiC.

Спектры комбинационного рассеяния получены с помощью спектрометра Confotec NR 500. В качестве возбуждающего излучения использовался лазерный ис-

точник с длиной волны 532 nm . Мощность излучения, падающего на поверхность пластины, составляет около 27 mW . Измерения проводились путем сканирования лазерным пучком поверхности экспериментальных образцов. Сканирование по длине волн осуществлялось с помощью дифракционной решетки с плотностью штрихов 1800 mm^{-1} . Рассеянное излучение регистрировалось ПЗС-матрицей. Время экспозиции в каждой точке составляет 4 s .

Для проведения исследований были получены спектральные карты с размерами $30 \times 30 \mu\text{m}$. Карта представляет собой набор спектров, полученных при поточном прохождении лазерного пучка по поверхности пластины. Шаг между точками составлял $0.5 \mu\text{m}$, размер лазерного пятна $0.6 \mu\text{m}$.

Спектральные карты были переработаны в программной среде Python в карты распределения остаточных напряжений. На рис. 2 представлены примеры спектральной линии и сопоставления карты остаточных напряже-

Значения остаточных напряжений экспериментальных образцов 3C–SiC/Si

| Тип подложки | Значения остаточных напряжений, МПа | |
|---------------------------------|---|--|
| | Определенные по смещению ТО линий спектров комбинационного рассеяния (± 0.5 МПа) | Определенные по спектрам рентгеновской дифрактометрии (± 0.5 МПа) |
| Si (100) | 925.8 811.0 | – – |
| Si (100) с пористым слоем | 466.7 504.9 543.2 | 449.3 571.1 – |
| Si (111) | 752.5 | – |

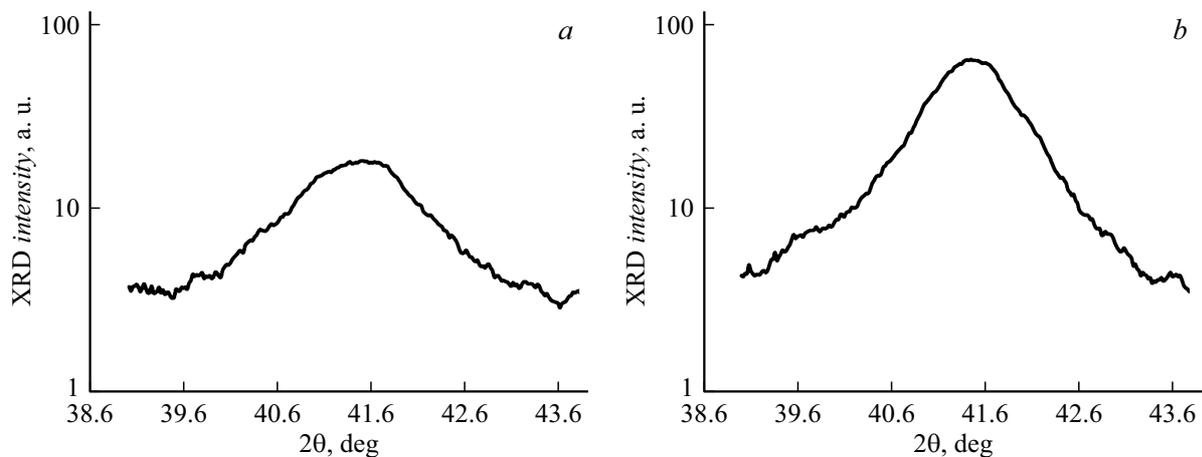


Рис. 3. Рентгенодифракционные пики экспериментальных образцов 3C–SiC/Si, синтезированных на подложках с ориентацией поверхности (111).

ний с РЭМ изображением экспериментальных образцов, выращенных на подложках кремния с ориентацией поверхности (111). На спектральной линии (рис. 2, *a*) наблюдается пик 3C–SiC на частоте 797 cm^{-1} , соответствующий поперечным оптическим (ТО) фононам. Визуально распределение остаточных напряжений на поверхности образца представляет собой темные изолированные зоны, соответствующие сжатию материала (отрицательные значения, [МПа]) в окружении областей, где преобладает растяжение (положительные значения, [МПа]). Полученная картина распределения остаточных напряжений имеет сходство с распределением пор в плоскости сопряжения эпитаксиальной пленки и подложки, т.е. зоны, где преобладает сжатие, относятся к участкам слоя SiC над порами. Данные расшифровки карт приведены в таблице. Значения остаточных напряжений σ_{res} в определенных пределах погрешности соответствуют значениям, взятым из литературных источников [2–5].

Также значения остаточных напряжений синтезированных пленок находили по спектрам рентгеновской дифрактометрии. Расчет остаточных напряжений основан на представлении об изменении межплоскостных расстояний в кристалле при упругой деформации. При

наличии упругих напряжений в пленке карбида кремния система плоскостей (hkl) изменяет строго определенное значение межплоскостного расстояния d_0 . Величина остаточных напряжений определяется по соответствующему значению относительной деформации ε . Значение остаточных напряжений в пленке определяется следующей формулой:

$$\sigma_{res} = \frac{d_0 - d}{d_0} \frac{M_{hkl}}{\mu}, \quad (4)$$

где d_0 , [nm] — межплоскостное расстояние в монокристалле 3C–SiC; d , [nm] — межплоскостное расстояние в упруго-напряженной пленке 3C–SiC; M_{hkl} — модуль упругости для плоскостей {100} и {111} 3C–SiC; μ — коэффициент Пуассона [9,13]. Межплоскостные расстояния определялись анализом рентгенодифракционных спектров экспериментальных образцов, с помощью условия Вульфа–Брэгга.

Измерение рентгенодифракционных спектров экспериментальных образцов проводилось на дифрактометре „Ultima IV“ (Rigaku) с использованием $\text{CuK}\alpha$ -излучения ($\lambda = 0.15406\text{ nm}$) по двухкристальной схеме. На рис. 3 приведены примеры снятых спектральных линий, первого порядка от плоскостей отражения {100} 3C–SiC.

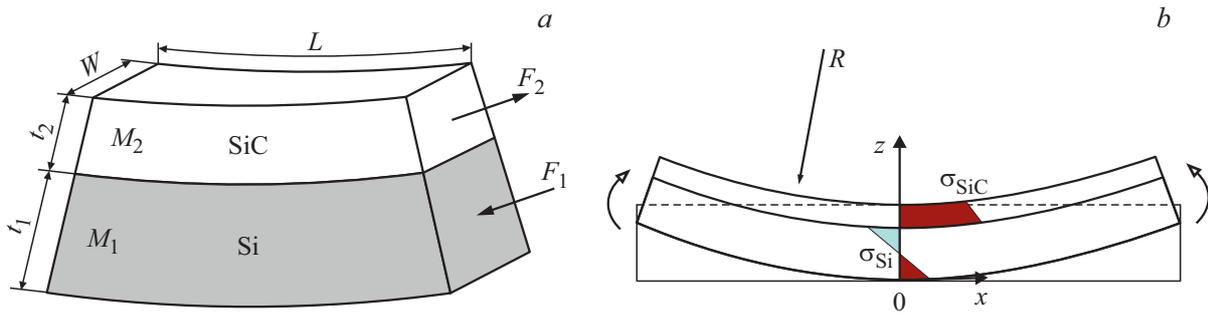


Рис. 4. Схема изогнутой двухслойной структуры 3C-SiC/Si.

Расчет остаточных напряжений по формулам (3) и (4) дает значения для структур 3C-SiC/Si и 3C-SiC/por-Si, приведенные в таблице.

При этом степени релаксации пленки $R_{rel} > 0.95$. Степень релаксации определяется выражением

$$R_{rel} = 1 - \frac{\epsilon_{res}}{\epsilon_{max}}, \tag{5}$$

где $\epsilon_{res} = \sigma_{res}/E_{hkl}$, $\epsilon_{max} = \epsilon_0$.

3. Оценка значения напряжений несоответствия

С учетом сказанного выше, распределение механического напряжения в структуре 3C-SiC/Si можно построить с использованием модели, предложенной в [14,15]. В рамках данной модели рассматривается деформация двухслойной структуры, шириной W , постоянными упругости M_i и толщинами слоев t_i , радиусом кривизны R , как показано на рис. 4, а. На систему действуют силы растяжения-сжатия F_i . Здесь $i = 1$ и 2 обозначают подложку кремния и слой карбида кремния соответственно.

Система координат выбрана таким образом, что оси x и y параллельны поверхности подложки, ось z ориентирована по нормали к поверхности гетероструктуры, как показано на рис. 4, б. Таким образом, напряжение по оси z принято равным нулю. Для сведения задачи к одному измерению принимается, что длина выделенного элемента $L \gg W$, в этом случае изгибом по ширине можно пренебречь.

Построение эпюр напряжений слоев происходит с помощью условий равновесия сил F_i . Условия равновесия представлены выражениями:

$$F_1 - F_2 = 0. \tag{6}$$

Согласно уравнениям (2), напряжения растяжения-сжатия определяются выражениями

$$\sigma_{p-c} = \frac{F_{s-c}}{Wt_i} = M_i \epsilon_i, \tag{7}$$

где F_{s-c} — силы растяжения-сжатия.

При сравнении сил F_{s-c} , создающих деформации равной величины, для подложек кремния соотношение $F_{(s-c)1}/F_{(s-c)2} \sim 10^3$. В связи с этим в рамках рассматриваемой модели деформацией сжатия подложки можно пренебречь.

Деформацию слоя 3C-SiC ($i = 2$) можно представить суммой деформаций решетки $\epsilon_0 = \Delta a/a_0$, несоответствия коэффициентов теплового расширения $\Delta\alpha$, изгиба гетероструктуры, а также составляющей, определяемой образованием дислокаций. Согласно теории упругости [11], деформация, обусловленная изгибом, задается как $\epsilon_{bend} = t_i/2R$. Поскольку сжимаемость подложки не учитывается, то ее деформация определяется изгибом. Таким образом, деформации на гетерогранице можно представить в виде

$$\epsilon_1 = \frac{t_1}{2R}, \quad \epsilon_2 = \epsilon_0 + \Delta\alpha\Delta T - \rho_0 b - \epsilon_{ph} - \frac{t_2}{2R}, \tag{8}$$

где ϵ_0 — деформация пленки SiC [6]; $\Delta\alpha$ — разность коэффициентов теплового расширения слоев материалов 1 и 2, $\Delta T = 1280^\circ\text{C}$; $\rho_0 = 10^6$, $[\text{cm}^{-1}]$ и b — линейная плотность и модуль вектора Бюргера системы дислокаций, введенных в пленку. Линейная плотность дислокаций представляет собой число дислокационных линий, пересекающих отрезок направления длиной 1 см. Для плоскостей (111) и (001) вектор Бюргера равен $a_{\text{SiC}}/\sqrt{2}$ и $a_{\text{SiC}}/2\sqrt{2}$ соответственно. Слагаемое ϵ_{ph} характеризует релаксацию напряжений на границах доменов. С учетом выражений (8) приложенные силы:

$$F_1 = M_1 W \frac{t_1^2}{2R},$$

$$F_2 = M_2 t_2 W \left(\epsilon_0 + \Delta\alpha\Delta T - \rho_0 b - \epsilon_{ph} - \frac{t_2}{2R} \right). \tag{9}$$

Уравнения (6) и (8) дают значение для радиуса кривизны структуры:

$$R = \frac{M_1 t_1^2 + M_2 t_2^2}{2M_2 t_2 (\epsilon_0 + \Delta\alpha\Delta T - \rho_0 b - \epsilon_{ph})}. \tag{10}$$

Аналитическое выражение механических напряжений в гетероструктурах 3C-SiC/Si можно вывести из анализа деформации изгиба (рис. 5). Двумя сечениями

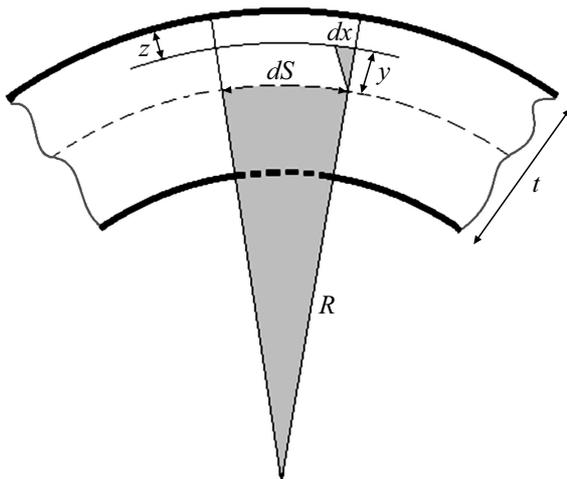


Рис. 5. Схема участка пластины, подверженной деформации изгиба.

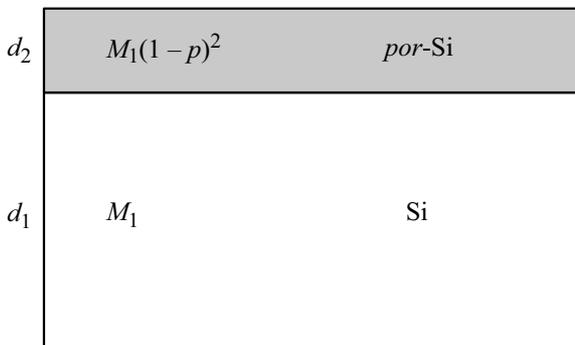


Рис. 6. Значения модуля упругости в подложке Si с пористым слоем.

выделим малый элемент пластины. Нейтральная линия (пунктирная) делит сечение на две части, в одной из которых действуют растягивающие внутренние силы, а в другой — сжимающие.

Длина отрезка нейтрального слоя dS . При деформации изгиба длина нейтральной линии не меняется. Линия, находящаяся на расстоянии y , изменит свою длину на величину dx . При малых значениях dS имеет место следующее соотношение:

$$\frac{dx}{dS} = \frac{y}{R}. \tag{11}$$

Левая часть формулы (11) есть относительная деформация ε . Если присвоить деформации растяжения знак „+“ и ввести координату z , с нулевым значением на выпуклой границе, то выражение для деформации принимает вид

$$\varepsilon = \frac{y}{R} = \frac{1}{R} \left(\frac{t}{2} - z \right). \tag{12}$$

Напряжение в i -м слое $\sigma_i(z)$ задается суммой составляющих, вызванных приложенной силой F_i , и деформа-

цией изгиба [15]. Для подложки кремния

$$\sigma_1(z) = \frac{M_1}{R} (t_1 - z), \tag{13}$$

где z — координата в i -м слое, измеренная со „дна“. В свою очередь, для слоя 3C–SiC

$$\sigma_2(z) = M_2(\varepsilon_0 + \Delta\alpha\Delta T - \rho_0 b - \varepsilon_{ph}) + \frac{M_2}{R} \left(\frac{t_2}{2} - z \right). \tag{14}$$

Ранее авторами [6,8] экспериментально показано, что применение пористого кремния в качестве буферного слоя в гетероструктурах 3C–SiC/Si, позволяет снизить значение остаточных напряжений. Для получения выражений, описывающих остаточные напряжения в гетероструктурах 3C–SiC/por-Si необходимо ввести указанные ниже корректировки.

Построение эпюр напряжений при наличии буферного мезопористого слоя проводится по аналогичной схеме с помощью уравнений равновесия. Условие равновесия также описывается уравнением (6). Выражение для деформации слоя карбида кремния можно получить введением упрощенной модели пористого слоя как массива вертикальных цилиндрических пор в сплошном материале. Подобная модель представлена в работе [16]. В описываемой структуре площадь сопряжения пленки карбида кремния и подложки определяется пористостью буферного слоя (p). Для учета влияния пористости на деформацию ε_i введен поправочный коэффициент $(1 - p)^2$ [17]. Данный коэффициент характеризует среднюю площадь сопряжения 3C–SiC/Si. В таком случае деформации на гетерогранице

$$\varepsilon_1 = \frac{t_1}{2R}, \quad \varepsilon_2 = (\varepsilon_0 + \Delta\alpha\Delta T - \rho_0 b - \varepsilon_{ph})(1 - p)^2 - \frac{t_2}{2R}. \tag{15}$$

Значение постоянной упругости подложки M_1 меняется скачкообразно на границе раздела „сплошной материал–пористый слой“. Изменение модуля упругости схематически представлено на рис. 6. Значение постоянной упругости в пористом слое равно $M_1(1 - p)^2$.

В рассматриваемой модели можно наблюдать два крайних условия: $d_2 \ll d_1$ и $d_2 \gg d_1$. В первом случае, когда толщина пористого слоя пренебрежимо мала, можно принять общее значение постоянной упругости подложки равным M_1 . Тогда решение уравнений равновесия дает следующее выражение для радиуса кривизны гетероструктуры:

$$R = \frac{M_1 t_1^2 + M_2 t_2^2}{2M_2 t_2 (\varepsilon_0 + \Delta\alpha\Delta T - \rho_0 b - \varepsilon_{ph})(1 - p)^2}. \tag{16}$$

Во втором предельном случае, при $d_2 \gg d_1$, выражение для радиуса кривизны принимает вид

$$R = \frac{M_1 t_1^2}{2M_2 t_2 (\varepsilon_0 + \Delta\alpha\Delta T - \rho_0 b - \varepsilon_{ph})} + \frac{t_2}{2(\varepsilon_0 + \Delta\alpha\Delta T - \rho_0 b - \varepsilon_{ph})(1 - p)^2}. \tag{17}$$

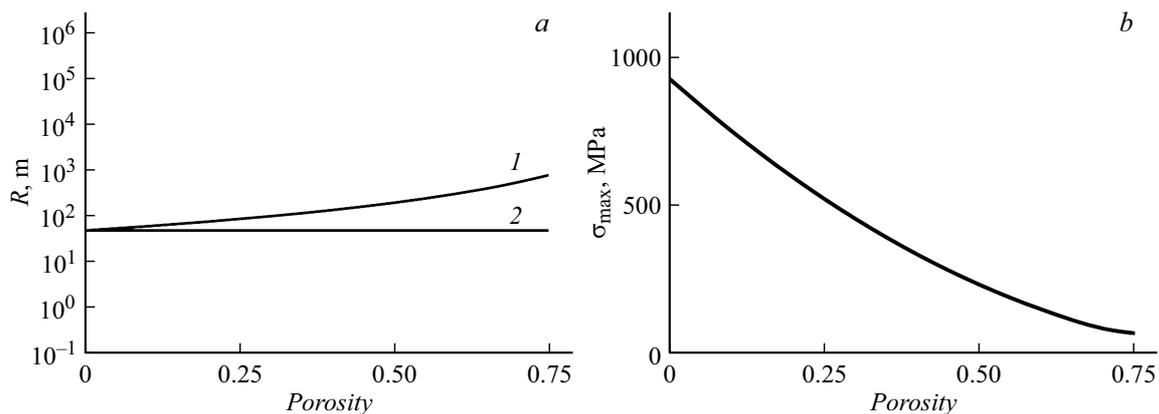


Рис. 7. *a* — вид теоретической зависимости $R(p)$: 1 — при $d_2 \ll d_1$, 2 — при $d_2 \gg d_1$; *b* — вид теоретической зависимости остаточного напряжения в пленке 3C–SiC.

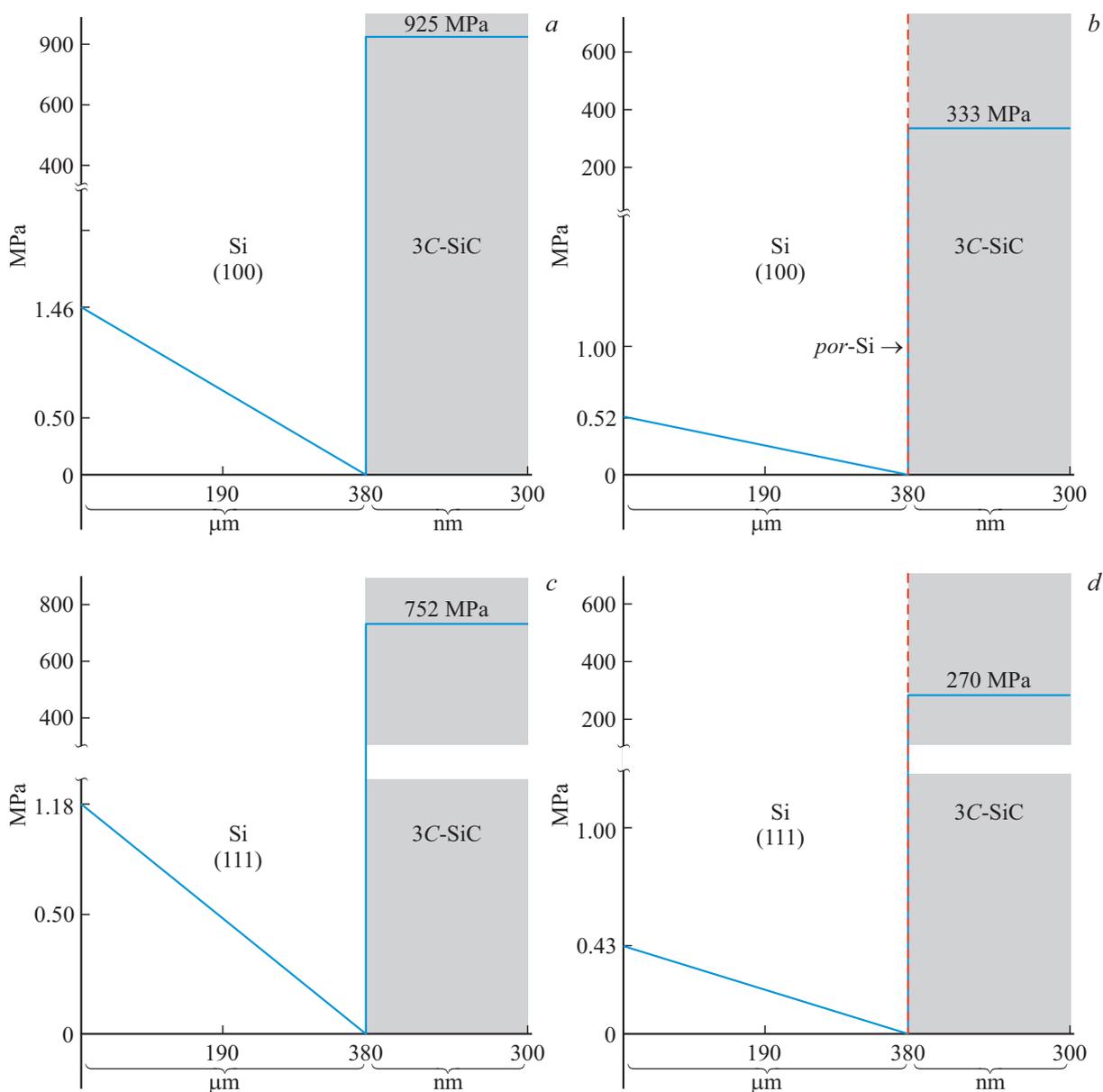


Рис. 8. Эпюры напряжений несоответствия: *a, c* — в объеме гетероструктуры 3C–SiC/Si; *b, d* — в объеме гетероструктуры 3C–SiC/Si с применением буферного слоя пористого кремния. Эпюры построены для подложек с ориентацией поверхности (100) и (111).

Зависимость значения радиуса кривизны $R(p)$ и максимального остаточного напряжения $\sigma(p)$ структуры $3C-SiC/por-Si$, и ориентация поверхности (100), приведены на рис. 7. Участки кривых $R(p)$ и $\sigma(p)$ находятся в диапазоне технологически достижимых значений пористости ($0 \leq p \leq 0.75$). Поведение величины радиуса кривизны позволяет рассматривать условие $d_2 \ll d_1$ как наиболее оптимальное для пленок $3C-SiC$ на подложках кремния с пористым слоем. В точке $p = 0.4$ значение остаточного напряжения падает в e раз.

С помощью выражений (10)–(14) можно построить эпюры внутренних напряжений структур $3C-SiC/Si$ и $3C-SiC/por-Si$ для значения толщины слоя $3C-SiC$ $t_2 = 300$ nm. Вид эпюр приведен на рис. 8. Значение пористости буферного слоя $p = 0.4$.

Построенные эпюры напряжения показывают что, применение буферного слоя $por-Si$ снижает механические напряжения примерно на 64%. Полученные значения остаточных напряжений соответствуют экспериментальным данным. Также следует заметить, что рассчитанные значения напряжений значительно меньше предела упругости монокристаллического карбида кремния $\sigma_{el} = 21$ GPa [18]. Также получены оценочные значения вклада границ зерен в уменьшение деформации пленок ε_{ph} . Для случая подложек кремния с ориентацией поверхности (100) и (111) ε_{ph} равна $4.38 \cdot 10^{-2}$ и $4.78 \cdot 10^{-2}$ соответственно.

Таким образом, эпюры механических напряжений подтверждены расчетом остаточных напряжений в экспериментальных образцах гетероструктур $3C-SiC/Si$ и $3C-SiC/por-Si$.

Гетероэпитаксиальный рост пленки $3C-SiC$ на подложке кремния с мезопористым буферным слоем происходит как на поверхности сопряжения со стенками остова, так и над порами. Образование $3C-SiC$ над порами идет путем их зарастания. Гетероэпитаксия на поверхности сопряжения со стенками пор, как и в случае роста пленки $3C-SiC$ на сплошном материале подложки, проходит под влиянием факторов несоответствия по параметрам кристаллических решеток и коэффициентов теплового расширения, приводящих к образованию дислокаций несоответствия.

В гетероэпитаксиальной структуре $3C-SiC/Si$ линейную плотность дислокации можно представить выражением

$$\rho = \frac{\rho_0}{(1 + \frac{r^2}{l^2})^2}, \quad (18)$$

где r — средний диаметр пор, l — толщина стенок остова, ρ_0 , [cm^{-1}] — максимальная линейная плотность дислокаций.

Выражение (18) истинно при значениях толщины стенок пор $l > 1/\rho_0$. Согласно (18), с увеличением толщины стенок пористого слоя вклад факторов несоответствия решеток при гетероэпитаксии $3C-SiC$ растет и плотность дислокаций стремится к значению ρ_0 . Для случая $l < 1/\rho_0$ в рамках предложенной модели ожидается рост пленки $3C-SiC$ без образования дислокаций.

Заключение

В работе представлена модель процесса релаксации напряжений несоответствия в гетероструктурах $3C-SiC/Si$.

На основе предложенного подхода к описанию процессов релаксации напряжений несоответствия удалось получить аналитические выражения, отражающие влияние факторов толщины и пористости буферного слоя на распределение механических напряжений и деформаций в системе $3C-SiC/por-Si$. Получены оценочные значения параметра ε_{ph} характеризующего вклад границ зерен эпитаксиальных пленок $3C-SiC$ в релаксацию упругих напряжений. Для пленок $3C-SiC$ на подложках с ориентацией поверхности (100) и (111) ε_{ph} равна $4.38 \cdot 10^{-2}$ и $4.78 \cdot 10^{-2}$ соответственно.

Применяя методику оценки величины остаточного напряжения по смещению линий на рамановских и рентгенодифракционных спектрах, получены экспериментальные значения σ_{res} , согласующиеся с результатами теоретического расчета, а также данными, взятыми из литературных источников. Расчетные данные подтверждены результатами экспериментальной оценки остаточных напряжений для образцов, синтезированных на поверхностях Si(100) и Si(111), а также Si(100) с мезопористым слоем. Исследования показали, что применение буферного слоя мезопористого кремния приводит к уменьшению примерно на 64% величины остаточных напряжений на гетерогранице $3C-SiC/Si$.

Благодарности

Работа проведена с применением оборудования центра коллективного пользования „Гетероструктурная СВЧ-электроника и физика широкозонных полупроводников“ Национального исследовательского ядерного университета МИФИ.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] А.А. Лебедев, Е.В. Калинина, В.В. Козловский. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, (4), 77 (2018). DOI: 10.7868/S0207352818040121
- [2] F. Liu, J. Chu, C. Carraro, R. Maboudian. J. Appl. Phys., (106), 013505 (2009). DOI: 10.1063/1.3157184
- [3] А.А. Volinsky, G. Kravchenko, P. Waters, J.D. Reddy, C. Locke, C. Frewin, S.E. Saddow. Mater. Res. Society Symposia Proceed., **1069** (2009). DOI: 10.1557/PROC-1069-D03-05
- [4] D.N. Talwar, L. Wan, C.C. Tin, Z.C. Feng. J. Mater. Sci. Eng., **6** (2), 1 (2017). DOI: 10.4172/2169-0022.1000324

- [5] H. Mukaida, H. Okumura, J.H. Lee, H. Daimon, E. Sakuma, S. Misawa, K. Endo, S. Yoshida. *J. Appl. Phys.*, **62**, 254 (1987). DOI: 10.1063/1.339191
- [6] Р.С. Телятник, А.В. Осипов, С.А. Кукушкин. *ФТТ*, **57**(1), 153 (2015). [R.S. Telyatnik, A.V. Osipov, S.A. Kukushkin. *Phys. Solid State*, **57**, 162 (2015). DOI: 10.1134/S106378341501031X]
- [7] О.М. Сресели, Д.Н. Горячев, В.Ю. Осипов, Л.В. Беляков, С.П. Вуль, И.Т. Серенков, В.И. Сахаров, А.Я. Вуль. *ФТП*, **36**(5), 604 (2002). [O.M. Sreseli, D.N. Goryachev, V.Yu. Osipov, L.V. Belyakov, S.P. Vul', I.T. Serenkov, V.I. Sakharov, A.Ya. Vul'. *Semiconductors*, **36**(5), 574 (2002). DOI: 10.1134/1.1478551]
- [8] N.I. Kargin, A.O. Sultanov, A.V. Bondarenko, V.P. Bondarenko, S.V. Red'ko, A.S. Ionov. *Russ. Microelectronics*, **43**(8), 531 (2014). DOI: 10.1134/S106373971408006X
- [9] A. Kelly, G.W. Groves. *Crystallography and crystal defects* (Longman, London, 1970)
- [10] Электронный ресурс. Режим доступа: <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/SiC/mechanic.html>
- [11] X. Хан. *Теория упругости. Основы линейной теории и ее применение*, пер. с нем. (М., 1988)
- [12] D. Olego, M. Cardona, P. Vogl. *Phys. Rev. B*, **25**(6), 3878 (1982). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.25.3878>
- [13] С.С. Горелик, Л.Н. Расторгуев, Ю.А. Скаков. *Рентгенографический и электроннооптический анализ* (практическое руководство) (Металлургия, М., 1970), с. 126.
- [14] R.H. Saul. *J. Appl. Phys.*, **40**, 3273 (1969). <https://doi.org/10.1063/1.1658174>
- [15] G.H. Olsen, M. Ettenberg. *J. Appl. Phys.*, **48**, 2543 (1977). <https://doi.org/10.1063/1.323970>
- [16] A.S. Gusev, N.I. Kargin, S.M. Ryndya, G.K. Safaraliev, N.V. Siglova, A.O. Sultanov, A.A. Timofeev. *J. Surf. Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniq.*, **13**(2), 280 (2019). DOI: 10.1134/S1027451019020083
- [17] И.Ю. Смолина, М.О. Еремин, П.В. Макаров, С.П. Буякова, С.Н. Кульков, Е.П. Евтушенко. *Вестник Томского гос. ун-та.*, **5**, 78 (2013).
- [18] C.M. Su, A. Fekade, M. Spencer, M. Wuttig. *J. Appl. Phys.*, **77**, 1280 (1995). <https://doi.org/10.1063/1.359579>