

Инфракрасная спектроскопия слоев карбида кремния, синтезированных методом замещения атомов на поверхности монокристаллического кремния

© С.А. Грудинкин^{1,3}, В.Г. Голубев¹, А.В. Осипов^{2,3}, Н.А. Феоктистов¹⁻³, С.А. Кукушкин²⁻⁴

¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

² Институт проблем машиноведения РАН,
Санкт-Петербург, Россия

³ Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет
информационных технологий, механики и оптики,
Санкт-Петербург, Россия

⁴ Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: sergey.a.kukushkin@gmail.com

(Поступила в Редакцию 8 июня 2015 г.)

Представлены результаты исследования методом инфракрасной (ИК) спектроскопии эпитаксиальных слоев карбида кремния, выращенных методом замещения атомов на поверхности монокристаллического кремния. В ИК-спектрах наблюдается полоса при 798 см^{-1} , соответствующая ТО-фонону в решетке карбида кремния. Определены параметры разупорядоченного карбида кремния, находящегося на поверхности пор между эпитаксиальным карбидом кремния и подложкой кремния. В ИК-спектрах карбида кремния обнаружена полоса в области 960 см^{-1} . Предложена гипотеза, согласно которой данная полоса соответствует энергии предсказанного ранее теоретически упругого диполя — упруго взаимодействующих атома углерода в межузельной позиции и кремниевой вакансии.

С.А. Кукушкин, А.В. Осипов, Н.А. Феоктистов благодарят за финансовую поддержку Российский научный фонд (грант № 14-12-01102).

1. Введение

В серии работ, обобщенных в обзорах [1–3], были заложены основные принципы и положения нового метода синтеза эпитаксиальных пленок карбида кремния (SiC) на Si. Данный метод получения пленок SiC на Si принципиально отличается от всех существующих в настоящее время способов и технологий выращивания монокристаллов, пленок и наноструктур. В его основе лежит идея замещения части атомов кремния атомами углерода внутри кремниевой подложки. Для реализации данного подхода в межузельную позицию решетки кремния предварительно внедряют атом углерода, а соседний с ней атом кремния удаляют, создавая кремниевую вакансию. При этом в приповерхностной области кремниевой решетки образуется ансамбль дилатационных диполей — устойчивых комплексов, состоящих из центров дилатации (атома углерода в межузельной позиции и кремниевой вакансии). В кристалле кубической симметрии эти два центра дилатации упруго взаимодействуют друг с другом. В частности, если дилатационные диполи расположены перпендикулярно плоскости (111) кремния, они притягиваются друг к другу и практически вся дилатационная упругая энергия, возникающая из-за внедрения атома углерода и образования вакансии, релаксирует. Синтез подобного рода упругих диполей осуществляется при помощи химической реакции между

кремнием и монооксидом углерода. Скорость данной химической реакции максимальна в направлении, вдоль которого дилатационные диполи притягиваются, т.е. вдоль направления [111] подложки Si. После завершения процесса химического превращения механические диполи, выполнившие свою роль, распадаются на пленку SiC и поры под ее поверхностью. Ориентацию пленки при этом задает „старая“ кристаллическая структура исходной матрицы Si, а не только поверхность подложки, как это обычно реализуется в традиционных методиках выращивания пленок. Температура и давление газа выбираются так, чтобы процессы зарождения зародышей SiC и пор протекали одновременно и с одинаковой скоростью. Образование упругих диполей атом углерода–вакансия Si позволяет получать пленки карбида кремния высокого качества. Структура, состав и ряд свойств пленок SiC, выращенных методом замещения атомов, были исследованы при помощи различных методик [1,2]. Однако до сих пор слои SiC, выращенные методом замещения атомов, не были исследованы при помощи такого широко используемого при изучении структуры кристаллического SiC [4–10] неразрушающего оптического метода характеристики, как метод инфракрасной (ИК) спектроскопии. Хорошо известно, что при взаимодействии колебательных мод SiC с инфракрасным излучением в ИК-спектре наблюдаются сильные особенности в диапазоне волновых чисел

750–1000 cm^{-1} . В этот спектральный диапазон попадает область оптических колебаний решетки карбида кремния (область „остаточных“ лучей) [11]. Параметры ИК-спектра в этой области отражают диэлектрическую проницаемость и структурные свойства SiC (частоты и величины затухания оптических фононов в решетке SiC, толщину слоя SiC, пористость, концентрацию свободных носителей, шероховатость интерфейсов) [4–6,9].

Так, в работе [9] методом ИК-спектроскопии были исследованы тонкие слои SiC, полученные имплантацией ионов C^+ в монокристаллическую подложку Si, и обнаружено влияние изотермического отжига на их структуру. В [5] были измерены ИК-спектры пористого SiC и обсуждалась возможность использования различных моделей эффективной диэлектрической проницаемости пористого SiC при расчете ИК-спектров отражения. Анализ расчетных и экспериментальных ИК-спектров пленок 3C-SiC, полученных методом газофазного осаждения на Si, позволил авторам работы [4] сделать выводы о шероховатости поверхности пленки SiC, толщине пленки, концентрации носителей в промежуточном слое между пленкой и подложкой.

В последнее время интерес к исследованию карбида кремния вызван также возможностью возбуждения в нем поверхностных фононных поляритонов в средней ИК-области [12,13]. В связи с этим нанорезонаторы на основе карбид кремния рассматриваются в качестве перспективной платформы для средней ИК-нанопотоники, ИК-спектроскопии высокого разрешения и для создания диэлектрических метаматериалов [12].

В настоящей работе методом ИК-спектроскопии исследованы образцы SiC, синтезированные методом замещения атомов на поверхности монокристаллического кремния. Исследуемая структура представляет собой эпитаксиальный слой кубического *c*-SiC [14], между которым и подложкой Si находятся поры микронных размеров, стенки которых покрыты слоем разупорядоченного SiC [1–3]. Результаты исследования методом рамановского рассеяния света таких образцов были ранее представлены нами в работе [14].

2. Методика эксперимента и образцы

Метод синтеза исследуемых образцов SiC путем замещения атомов в кристаллической решетке кремния подробно изложен в [1–3]. Параметры синтеза слоев SiC были следующими: температура процесса 1250°C, время процесса 20–30 min, скорости нагрева и остывания вблизи температуры процесса 10–20°C/min, давление монооксида углерода 0.5–1 Торр, расход монооксида углерода 5–10 sccm.

ИК-спектры измерены с помощью инфракрасного Фурье-спектрометра фирмы Брукер IFS-113v. Измерения проводились в диапазоне волновых чисел 400–5000 cm^{-1} со спектральным разрешением 4 cm^{-1} . Спектры получены с участка образца размером

1.25 × 1.25 mm. Спектры отражения измерены с помощью специальной оптической приставки при угле падения излучения $\sim 11^\circ$ к нормали к поверхности образца. Аллюминиевое зеркало использовалось в качестве эталонного при измерении спектров отражения. Спектры пропускания записаны при нормальном падении излучения на образец. Измерения проводились в вакууме.

Методика спектральной эллипсометрии с использованием прибора J.A. Woollam Co., Inc. USA года 2008 выпуска применялась для определения толщины и показателя преломления монокристаллических слоев SiC. Толщина эпитаксиальной пленки SiC составляла 40 nm.

Исследование морфологии поверхности слоев SiC проводилось с помощью атомно-силового микроскопа SMENA фирмы NT-MDT с использованием активного антивибрационного стола HalcyonicsNano 20/30. Среднеквадратичная шероховатость поверхности образцов SiC составляла 10–20 nm.

3. Экспериментальные результаты и их обсуждение

В процессе эпитаксиального роста образование слоя SiC происходило не только на лицевой стороне подложки, но и на стороне, соприкасающейся с держателем подложки (обратной стороне). Свойства SiC на обратной стороне подложки могут отличаться от свойств SiC на лицевой стороне. Для исключения вклада в ИК спектр SiC, находящегося на обратной стороне подложки, она была подвергнута полировке алмазной пастой. Подтверждением полного удаления SiC стали данные метода эллипсометрии, в соответствии с которыми показатель преломления обратной стороны подложки оказался близким к показателю преломления кристаллического Si. На рис. 1 представлены спектры

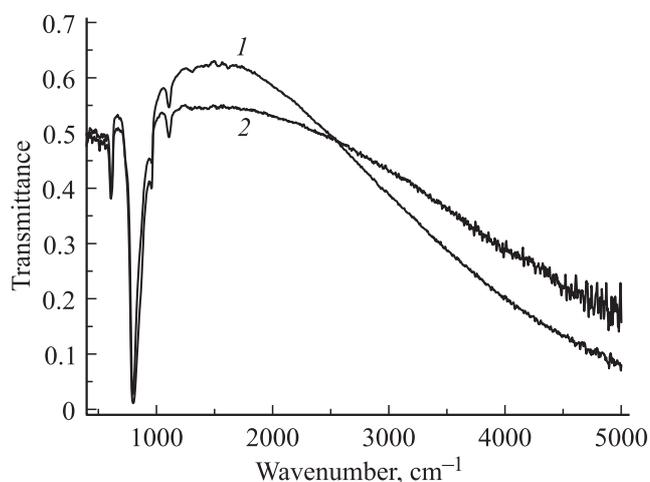


Рис. 1. ИК-спектр пропускания слоев SiC, синтезированных методом замещения атомов на поверхности Si с механически неполированной (1) и полированной (2) обратной стороной подложки.

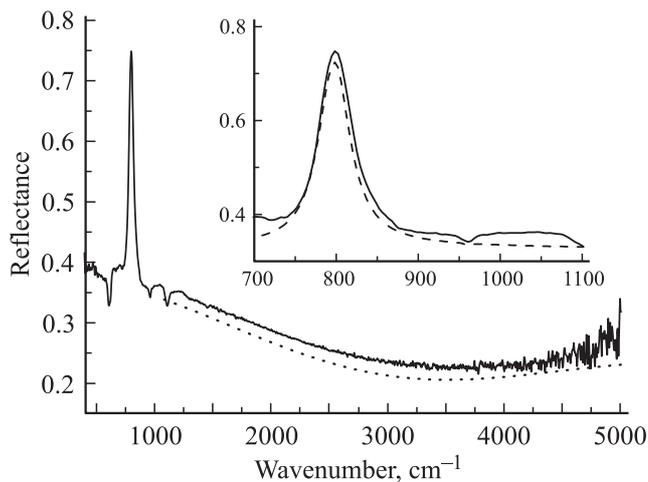


Рис. 2. Спектр отражения слоев SiC, синтезированных методом замещения атомов на поверхности Si с полированной обратной стороной подложки. Сплошная кривая — экспериментальный спектр, пунктирная и штриховая линии — расчетные спектры в диапазонах 100–5000 и 700–1100 cm^{-1} соответственно. На вставке показан участок спектра в области колебаний решетки SiC.

пропускания для образцов с механически неполированной (1) и полированной (2) обратной стороной подложки. В коротковолновой области для волновых чисел более 2500 cm^{-1} после удаления SiC с обратной стороны образца коэффициент пропускания возрастает, а в области $1200\text{--}2500 \text{ cm}^{-1}$ уменьшается. На рис. 2 представлен спектр отражения образца SiC с полированной обратной стороной. В ИК-спектрах пропускания и отражения исследуемых образцов наблюдается ряд узких полос в диапазоне волновых чисел $500\text{--}1100 \text{ cm}^{-1}$. В спектре отражения для волновых чисел больше $\sim 1100 \text{ cm}^{-1}$ наблюдается плавная зависимость с широким минимумом в области $3500\text{--}4000 \text{ cm}^{-1}$ (рис. 2).

Пик в спектре пропускания и провал в спектре отражения при 798 cm^{-1} соответствует поперечному оптическому фонону (ТО-фонону) в решетке SiC (рис. 1 и 2) [11,15]. Полоса ИК-поглощения с волновым числом 1100 cm^{-1} обусловлена валентными колебаниями связей Si–O–Si в подложке Si [16]. Полоса при 610 cm^{-1} возникает за счет колебаний связей Si–Si в подложке и является суперпозицией полос, включающих два фонона (TO + TA, TA — поперечный акустический фонон) с одинаковыми волновыми векторами, но принадлежащих разным линиям колебательного спектра [17]. В спектрах пропускания и отражения мы обнаружили полосу в области 960 cm^{-1} . По своему спектральному положению эта полоса находится между поперечным (798 cm^{-1}) и продольным (LO) (973 cm^{-1}) оптическими фононами в области „остаточных“ лучей. В [5–7,18] в ИК-спектрах образцов SiC, полученных различными методами, также наблюдалась полоса в области $950\text{--}960 \text{ cm}^{-1}$. Так, авторы работ [6,18] полосу в области 950 cm^{-1} объясняли наличием шероховатых интерфейсов SiC. Для

того чтобы учесть шероховатость интерфейсов, при расчетах ИК-спектров отражения вводился дополнительный слой дефектного SiC с соответствующими оптическими параметрами [6]. В [5] появление полосы в области $950\text{--}960 \text{ cm}^{-1}$ в ИК-спектре пористого 6H-SiC приписывается поверхностному оптическому фонону. Действительно, в области, где располагается эта полоса, вещественная часть диэлектрической проницаемости SiC меньше нуля, что является необходимым условием существования поверхностных фононов. Для расчета профиля ИК-спектра, учитывающего наблюдаемые особенности в области „остаточных“ лучей, в работе [5] проанализированы различные формулы для задания эффективной диэлектрической проницаемости пористого 6H-SiC. Показано, что для хорошего совпадения расчетного спектра с экспериментальным эффективная диэлектрическая проницаемость пористого SiC может быть рассчитана в приближении Максвелла–Гарнетта. При наклонном падении излучения на слой SiC в спектрах отражения в работе [19] и пропускания в работе [9] наблюдался провал при 960 cm^{-1} . Причиной этого провала являлся эффект Берремана, при котором при наклонном падении *p*-поляризованного излучения на образец в его спектре пропускания и отражения появляется полоса поглощения в области LO-фонона [20]. В нашем случае полоса в области $\sim 960 \text{ cm}^{-1}$ наблюдается как в спектре пропускания при нормальном падении излучения, так и в спектре отражения при угле падения $\sim 11^\circ$ в неполяризованном излучении. В работе [14] показано, что в наших образцах положение максимума линии LO-фонона в спектре рамановского рассеяния составляет 968 cm^{-1} . Отметим, что для объемного монокристаллического кубического SiC частота LO-фонона составляет $\sim 973 \text{ cm}^{-1}$, а для гексагонального $\sim 965 \text{ cm}^{-1}$ [14]. Учитывая неупорядоченную ориентацию кристаллитов SiC на поверхности пор относительно направления падающего излучения в наших образцах, нельзя исключить возможность появления в ИК-спектрах особенностей, связанных с LO-фононом. В работе [19] среди причин появления полосы в области $\sim 960 \text{ cm}^{-1}$ называется эффект Христиансена. Этот эффект наблюдается в двухфазной среде с сильной дисперсией показателя преломления, где при совпадении на определенной длине волны показателей преломления двух фаз происходит увеличение пропускания через среду. В нашем случае как в спектре пропускания, так и в спектре отражения наблюдается провал в области $\sim 960 \text{ cm}^{-1}$, что не позволяет связать наблюдаемую особенность с эффектом Христиансена.

В данном случае возникновение полосы в области 960 cm^{-1} мы связываем с иной причиной. Во Введении нами были описаны особенности получения SiC на Si методом замещения атомов. Эти особенности заключаются в формировании внутри кремниевой подложки упругих дилатационных диполей — устойчивых комплексов, состоящих из центров дилатации (атома углерода в межузельной позиции и кремниевой вакансии). В [21]

теоретически была рассчитана полная упругая энергия кристалла с дилатационными диполями. Эта энергия имеет вид [21]:

$$E_{\text{int}}(\cos \varphi_{x,y,z}) = -E_1 \left(\cos^4 \varphi_x + \cos^4 \varphi_y + \cos^4 \varphi_z - \frac{3}{5} \right) / r^3, \quad (1)$$

где

$$E_1 = \frac{15K(3c_{11} - 4c_{44})c_{12}\Omega^C\Omega^V\eta}{8\pi(c_{12} + 2c_{44})c_{44}},$$

$\cos \varphi_i = x_i/r$ — направляющие косинусы между осями x, y, z и направлением прямой, соединяющей центры взаимодействующих дефектов; r — расстояние между дефектами; модуль сжатия Si $K^{\text{Si}} = 0.98 \cdot 10^{11} \text{ N} \cdot \text{m}^{-2}$; c_{11}, c_{12} и c_{44} — модули упругости кубического кристалла (у кремния $c_{11} = 1.66 \cdot 10^{11} \text{ N} \cdot \text{m}^{-2}$, $c_{12} = 0.633 \cdot 10^{11} \text{ N} \cdot \text{m}^{-2}$, $c_{44} = 0.796 \cdot 10^{11} \text{ N} \cdot \text{m}^{-2}$); величина $\eta = (c_{11} - c_{12} - 2c_{44})/c_{44}$ называется параметром анизотропии кристалла, Ω^C, Ω^V — мощности первого и второго точечных дефектов, связанные с релаксационными объемами атома углерода и кремниевой вакансии. Согласно [21], они приблизительно равны $\Omega^C \approx -0.29V^{\text{Si}}$, $\Omega^V \approx -0.68V^{\text{Si}}$ (V^{Si} — объем на атом в кристалле кремния). Расчеты с использованием формулы (1) показали, что атом углерода, расположенный в междоузельной позиции Si, и кремниевая вакансия притягиваются друг к другу, если они расположены вдоль направления $\langle 111 \rangle$ в кристалле Si. При этом энергия их притяжения составляет $\sim 1 \text{ eV}$. Естественно, что образование данных комплексов должно отражаться в оптических спектрах, в частности в ИК-спектрах пропускания и отражения. В результате образования данного дефекта [21] в кристалле Si формируется следующая система: атом C, находящийся в междоузельной позиции, соединенный с вакансией Si механической связью, который мы обозначим C–V, и три незначительно растянутые химические связи с атомами Si. В настоящей работе мы не будем приводить точные расчеты подобного рода осциллятора. Приведем здесь лишь грубые оценки, считая, что у нас имеется простой гармонический осциллятор. Будем также считать, что вакансия закреплена неподвижно и колеблется только один атом углерода. В этом случае частота колебаний, как хорошо известно, равна

$$\nu = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{k/m_C}, \quad (2)$$

где $c \approx 2.99 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ — скорость света, $m_C \approx 1.99 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$ — масса атома углерода, k — константа жесткости связи. Константу жесткости можно найти из (1) как $k = (\partial^2 |E_{\text{int}}(\cos \varphi_{x,y,z})| / \partial^2 r) / r = r_e$. Отсюда имеем

$$k = 12E_1 \left(\cos^4 \varphi_x + \cos^4 \varphi_y + \cos^4 \varphi_z - \frac{3}{5} \right) / r_e^5, \quad (3)$$

где r_e — равновесное положение дефектов.

Как и в работе [21], рассмотрим только направление $\langle 111 \rangle$. При расчете энергии взаимодействия упругих диполей в кремнии в [21] расстояние r_e принималось равным длине связи в Si, т.е. $r_e \approx 2.35 \text{ \AA}$. Однако после преобразования в SiC подобного рода дефекты будут находиться уже не в кремнии, а в окружении карбида кремния или на границе Si–SiC. По сути, как показано в [21], это уже не кремний, а слегка растянутый вдоль направления $\langle 111 \rangle$ кубический карбид кремния, в котором атомы углерода незначительно смещены со своих мест, что приводит к „снятию“ кубического вырождения вдоль направления $\langle 111 \rangle$ и изменению соотношения c/a , где a — параметр решетки. Это соотношение будет отличаться от аналогичного соотношения для кубического кристалла. Таким образом, для расчета коэффициента k по формуле (3) необходимо использовать упругие модули не Si, а 3C-SiC, т.е. $K^{\text{SiC}} = 2.5 \cdot 10^{11} \text{ N} \cdot \text{m}^{-2}$, $c_{11} = 3.523 \cdot 10^{11} \text{ N} \cdot \text{m}^{-2}$, $c_{12} = 1.404 \cdot 10^{11} \text{ N} \cdot \text{m}^{-2}$, $c_{44} = 2.326 \cdot 10^{11} \text{ N} \cdot \text{m}^{-2}$. Отметим, что для SiC формулой (3) можно пользоваться только для грубых оценок. Она получена на основе формулы (1), которая была выведена при условии, что кристалл обладает слабой анизотропией, при которой параметр $|\eta| = (c_{11} - c_{12} - 2c_{44})/c_{44} < 1$. Для кремния это условие хорошо удовлетворяется, а для SiC $|\eta| \sim 1$, поэтому формула для SiC может быть использована только как оценочная.

Итак, с учетом отмеченного выше коэффициент жесткости связи в данном случае можно записать для направления $\langle 111 \rangle$ в виде $k = 1 \cdot 10^{-47} \text{ N} \cdot \text{m}^4 / r_e^5$. Если считать, что полоса $\nu = 960 \text{ cm}^{-1}$ связана со смещением атома углерода относительно кремниевой вакансии, то исходя из этих данных и формулы (3) можно оценить величину смещения центра атома углерода относительно центра кремниевой вакансии. Оценки показывают, что величина этого смещения равна $r_e \approx 1.14 \text{ \AA}$. Это очень близко к ковалентному радиусу атома кремния, составляющему $\sim 1.17 \text{ \AA}$ [22], что вполне разумно.

В работе [23], посвященной исследованию ИК-спектров кремния, содержащего углерод и вакансии в качестве примесей, была обнаружена линия, центрированная на $\nu = 943 \text{ cm}^{-1}$. Авторы предполагают, что за образование этой линии ответственны комплексы, состоящие из углерода и вакансии (C–V). Однако ни о каком упругом взаимодействии между этими дефектами авторы указанной работы даже не подозревали.

Исследуемые образцы представляют собой пленку монокристаллического SiC, под которой между нетронутым в процессе роста кремнием находятся образовавшиеся в процессе синтеза поры микронных размеров, покрытые SiC (рис. 3).

Образовавшиеся на поверхности пор кристаллиты SiC имеют неупорядоченную „сталактитоподобную“ структуру [2]. В диапазоне волновых чисел $1000\text{--}5000 \text{ cm}^{-1}$ наблюдается уменьшение коэффициента пропускания с ростом волнового числа, а коэффициент отражения

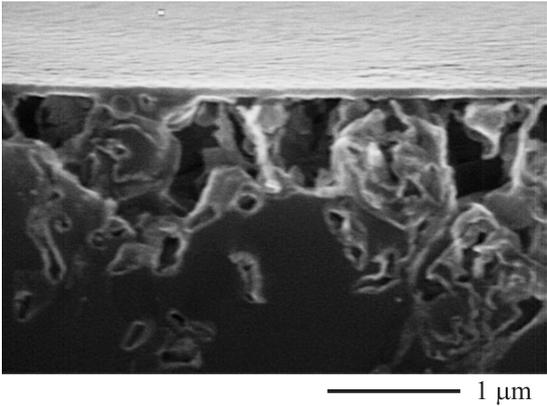


Рис. 3. Микрофотография сечения образца SiC/Si, полученная с помощью растрового электронного микроскопа. Под слоем SiC видны поры и пустоты в объеме Si.

(рис. 2) имеет минимум в области $3500\text{--}4000\text{ см}^{-1}$. Основной причиной изменения коэффициента пропускания и отражения в этом диапазоне является рассеяние излучения на системе пор микронных размеров, покрытых SiC. Из-за отсутствия поглощения в диапазоне волновых чисел $1000\text{--}5000\text{ см}^{-1}$ рассеяние можно считать упругим. Характерный широкий экстремум в спектре отражения свидетельствует о резонансном характере рассеяния. Размер пор (неоднородностей), которые являются центрами рассеяния, сопоставим по порядку величины с длиной волны ИК-излучения. Это позволяет использовать рассеяние Ми для грубой оценки параметров рассеивающего слоя [11]. Размер и диэлектрическая проницаемость пор определяют спектральное положение минимума в спектре отражения, а интенсивность экстремума пропорциональна концентрации пор. Расчет сечения рассеяния выполнен для центров рассеяния сферической формы с диэлектрической проницаемостью ϵ_p , находящихся в среде с такой же диэлектрической проницаемостью, как у кристаллического кремния [11]. Спектр отражения с учетом рассеяния вычислялся по формуле:

$$R(\nu) \approx 1 - NQ(\nu)\pi d^2/4, \quad (4)$$

где N — концентрация центров рассеяния, d — средний диаметр центра рассеяния, $Q(\nu)$ — эффективность рассеяния. Поскольку имеется большой разброс пор по размерам, при вычислении эффективности рассеяния учитывалось гауссово распределение пор по размерам. Подгонка рассчитанного по формуле (4) коэффициента отражения (рис. 2) под его экспериментальное значение позволила оценить диаметр $d \sim 1.6\text{ }\mu\text{m}$, $\epsilon_p \sim 2$ и поверхностную концентрацию центров рассеяния $N \sim 10^6\text{ см}^{-2}$. Таким образом, анализ ИК-спектров в этом диапазоне длин волн позволяет оценивать дефектность интерфейса между карбидом кремния и кремниевой подложкой и наблюдать изменения этой дефектности при изменении технологических условий роста карбида кремния.

Для проведения численной оценки параметров SiC осуществлялась подгонка теоретического спектра отражения к экспериментальному. Расчет проводился в области сильной дисперсии диэлектрической проницаемости $700\text{--}1100\text{ см}^{-1}$, в которой ИК-спектр наиболее чувствителен к параметрам SiC. В расчете мы полагали, что в этой области упругое рассеяние постоянно во всем диапазоне волновых чисел. Вклад в ИК-спектр от монокристаллической пленки SiC и неупорядоченного SiC на поверхности пор разделить не представляется возможным. Мы полагаем, что параметры монокристаллического SiC близки к параметрам структурно совершенного монокристалла кубического *c*-SiC, толщина этого слоя установлена методом эллипсометрии. Для рассматриваемого образца она составляет 40 nm . Для того чтобы определить количество неупорядоченного SiC в пористом слое, введем в расчеты однородный слой SiC, толщину и параметры которого будем определять путем подгонки. Таким образом, в расчете использовалась модель пленка монокристаллического SiC—однородный слой неупорядоченного SiC—кремниевая подложка с полированной обратной стороной. Диэлектрическая проницаемость кристаллического SiC в ИК-диапазоне хорошо описывается в рамках электронной теории дисперсии фоновых колебаний с использованием модели осциллятора Лоренца и с учетом вклада плазмонных колебаний [5,6,11]. Как указано в [5], при степени легирования менее $\sim 10^{18}\text{ см}^{-3}$, как в нашем случае, вкладом плазмонных колебаний в диэлектрическую проницаемость можно пренебречь. В модели осциллятора Лоренца диэлектрическая проницаемость SiC определяется формулой [11]

$$\epsilon_{\text{SiC}}(\omega) = \epsilon_{\infty} \left(\frac{\omega^2 - \omega_{\text{LO}}^2 + i\gamma\omega}{\omega^2 - \omega_{\text{TO}}^2 + i\gamma\omega} \right), \quad (5)$$

где ϵ_{∞} — высокочастотная диэлектрическая проницаемость, величины ω_{TO} и ω_{LO} являются частотами поперечного и продольного фонона, γ — коэффициент затухания фононов. Для монокристалла кубического *c*-SiC $\epsilon_{\infty} = 6.5$, $\omega_{\text{TO}} = 796\text{ см}^{-1}$, $\omega_{\text{LO}} = 972\text{ см}^{-1}$, $\gamma = 4.7\text{ см}^{-1}$ [15]. Расчет спектров отражения выполнен с помощью формул Френеля рекуррентным методом [8,24]. При подгонке расчетного спектра в диапазоне волновых чисел $700\text{--}1100\text{ см}^{-1}$ к экспериментальному варьировались толщина и коэффициент затухания фононов неупорядоченного SiC. Остальные параметры были приняты равными параметрам монокристаллического *c*-SiC. Расчетный спектр показан на рис. 2. В результате подгонки для слоя неупорядоченного SiC определены коэффициент затухания фононов 8 см^{-1} и толщина 120 nm . Отметим, что полученная в расчете толщина слоя неупорядоченного SiC почти в 3 раза больше толщины эпитаксиального монокристаллического SiC.

Коэффициент затухания фононов может быть принят в качестве меры совершенства кристаллической структуры SiC. Высококачественные структуры SiC характеризуются величиной затухания фононов $1\text{--}4\text{ см}^{-1}$.

В нашем случае увеличение значения величины коэффициента затухания до 8 см^{-1} связано с дефектами кристаллитов SiC, находящихся на поверхности пор. В [14] методом рамановского рассеяния с помощью конфокального микроскопа исследовались образцы SiC, синтезированные тем же методом, что и в настоящей работе. При измерении спектров в порах было обнаружено уширение линии рамановского рассеяния, соответствующей ТО-фонону в решетке SiC, относительно этой же линии вне пор. Отметим, что основная масса нераспавшихся диполей будет расположена именно на межфазной границе между эпитаксиальным слоем SiC и порами. Таким образом, диполи будут находиться на границе упорядоченной и неупорядоченных областей. Этот результат подтверждает наш вывод о большей дефектности кристаллитов SiC в порах и присутствии в них нераспавшихся диполей C–V.

4. Заключение

В работе методом ИК-спектроскопии исследованы образцы SiC, выращенные методом замещения атомов на поверхности монокристаллического кремния. В инфракрасных спектрах пропускания и отражения доминирует полоса при 798 см^{-1} , соответствующая ТО-фонону в кристаллической решетке c-SiC. Дефектность находящихся на поверхности пор кристаллитов SiC приводит к увеличению коэффициента затухания ТО-фононов (до 8 см^{-1}) по сравнению с высококачественным SiC, что проявляется в уширении полосы при 798 см^{-1} в спектре отражения. Наличие плавного минимума в ИК-спектрах отражения в области $3500\text{--}4000\text{ см}^{-1}$ объясняется рассеянием на системе пор между слоем монокристаллического SiC и кремниевой подложкой. При сопоставлении экспериментальных и рассчитанных спектров сделана оценка концентрации ($\sim 10^6\text{ см}^{-2}$) и размера ($\sim 1.6\text{ }\mu\text{m}$) центров рассеяния, характеризующих систему пор между эпитаксиальной пленкой SiC и подложкой Si. В ИК-спектрах обнаружена полоса в области 960 см^{-1} . Проведенный расчет показывает, что данная полоса соответствует энергии колебания предсказанного ранее теоретически упругого диполя — упруго взаимодействующих атома углерода в межузельной позиции и кремниевой вакансии. Отметим, что основная масса нераспавшихся диполей будет расположена на межфазной границе между эпитаксиальным слоем SiC и порами.

Список литературы

- [1] S.A. Kukushkin, A.V. Osipov. *J. Phys. D* **47**, 313 001 (2014).
- [2] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов, Н.А. Феоктистов. *ФТТ* **56**, 1457 (2014).
- [3] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов, Н.А. Феоктистов. *Рос. хим. журн.* **57**, 6, 36 (2013).
- [4] L. Dong, G. Sun, L. Zheng, X. Liu, F. Zhang, G. Yan, W. Zhao, L. Wang, X. Li, Z. Wang. *J. Phys. D* **45**, 245 102 (2012).

- [5] J.E. Spanier, I.P. Herman. *Phys. Rev. B* **61**, 10 437 (2000).
- [6] J.A.A. Engelbrecht, I.J. van Rooyen, A. Henry, E. Janzen, E.J. Olivier. *Physica B* **407**, 1525 (2012).
- [7] M.F. MacMillan, R.P. Devaty, W.J. Choyke, D.R. Goldstein, J.E. Spanier, A.D. Kurtz. *J. Appl. Phys.* **80**, 2412 (1996).
- [8] O. Pluchery, J.-M. Costantini. *J. Phys. D* **45**, 495 101 (2012).
- [9] И.К. Бейсембетов, К.Х. Нусупов, Н.Б. Бейсенханов, С.К. Жариков, Б.К. Кенжалиев, Т.К. Ахметов, Б.Ж. Сеитов. *Вестн. Нижегород. ун-та им. Н.И. Лобачевского* **4**, 42 (2013).
- [10] M.D. Sciacca, A.J. Mayur, E. Oh, A.K. Ramdas, S. Rodriguez, K. Furdyna, M.R. Melloch, C.P. Beetz, W.S. Yoo. *Phys. Rev. B* **51**, 7744 (1995).
- [11] К. Борен, Д. Хафмен. *Поглощение и рассеяние света малыми частицами*. Мир, М. (1986). 664 с.
- [12] Y. Chen, Y. Francescato, J.D. Caldwell, V. Giannini, T.W.W. Maß, O.J. Glembocki, F.J. Bezares, T. Taubner, R. Kasica, M. Hong, S.A. Maier. *ACS Photonics* **1**, 718 (2014).
- [13] D. Li, N.M. Lawandy, R. Zia. *Opt. Express* **21**, 20 903 (2013).
- [14] T.S. Perova, J. Wasyluk, S.A. Kukushkin, A.V. Osipov, N.A. Feoktistov, S.A. Grudinkin. *Nanoscale Res. Lett.* **5**, 1507 (2010).
- [15] H. Mutschke, A.C. Andersen, D. Clement, Th. Henning, G. Peiter. *Astron. Astrophys.* **345**, 187 (1999).
- [16] H.J. Hrostowski, R.H. Kaiser. *Phys. Rev.* **107**, 966 (1957).
- [17] F.A. Johnson. *Proc. Phys. Soc.* **73**, 265 (1959).
- [18] R.T. Holm, P.H. Klein, P.E.R. Nordquist, jr. *J. Appl. Phys.* **60**, 1479 (1986).
- [19] H. Hobert, H.H. Dunken, G. Peiter, W. Stier, M. Diegel, H. Stafast. *Appl. Phys. A* **69**, 69 (1999).
- [20] D.W. Berreman. *Phys. Rev.* **130**, 2193 (1963).
- [21] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. *Изв. РАН. Механика твердого тела* **2**, 122 (2013).
- [22] В.К. Вайнштейн, В.М. Фридкин, В.Л. Инденбом. *Современная кристаллография*. Наука, М. (1979). Т. 2. 360 с.
- [23] С.А. Londres, M.S. Potsidi, E. Stakakis. *Physica B* **340–342**, 551 (2003).
- [24] М. Борн, Э. Вольф. *Основы оптики*. Наука, М. (1973). 720 с.