

09,13

Микрокристаллическая структура и светоизлучающие свойства 3C-SiC островковых пленок, выращиваемых на поверхности Si(100)

© Л.К. Орлов^{1,2}, В.И. Вдовин⁴, Н.Л. Ивина³

¹ Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексева, Нижний Новгород, Россия

² Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия

³ РАНХ и ГС Академия при Президенте Российской Федерации, Нижний Новгород, Россия

⁴ Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия

E-mail: orlov@ipm.sci-ppov.ru

Поступила в Редакцию 21 февраля 2019 г.

В окончательной редакции 21 февраля 2019 г.

Принята к публикации 26 февраля 2019 г.

Изучаются особенности кристаллической структуры и светоизлучающие свойства островковых 3C-SiC пленок, выращиваемых при пониженных температурах на поверхности Si(100) методом вакуумной химической эпитаксии с использованием водородсодержащих соединений. Методами микроскопии прослеживается характер зарождения, механизмы роста нанокристаллической текстуры микроостровков, а также влияние на форму зарождающихся островков упругих напряжений, накапливаемых на поверхности растущей карбидной пленки. Проведено сопоставление спектров катодолюминесценции от поверхностного карбидизированного слоя Si и от различных участков отдельного 3C-SiC островка. Обсуждаются возможные механизмы появления в наблюдаемых спектрах эпитаксиальных структур дополнительных спектральных линий, сдвинутых относительно основного пика в красную и ультрафиолетовую области спектрального диапазона. Ранее эти полосы излучения обнаруживались только в спектрах люминесценции SiC нанокристаллитов, встраиваемых в различные (чаще всего SiO₂) матрицы. Сопоставительный анализ поведения линий в наблюдаемых люминесцентных спектрах не показал заметного влияния размеров формируемых поверхностных нанокристаллитов на их положение, но продемонстрировал их явную зависимость от содержания кислорода на границе между 3C-SiC слоем и кремниевой подложкой.

Ключевые слова: кубическая фаза карбида кремния, гетероэпитаксия, островковый рост, микрокристаллическая структура, катодолюминесценция, светоизлучающие механизмы.

DOI: 10.21883/FTT.2019.07.47845.386

1. Введение

В последние десятилетия в литературе широко обсуждаются особенности и механизмы гетероэпитаксии напряженных гетерокомпозиций на основе материалов с сильно различающимися значениями параметров кристаллических решеток, позволяющих формировать на поверхности пластины кристаллические образования наноразмерного масштаба с оригинальными физическими свойствами. В связи с задачами современной кремниевой электроники особый интерес вызывают гетероэпитаксии, содержащие слои карбида кремния, обладающие по отношению к кремнию довольно высоким (~ 19%) несоответствием периодов кристаллических решеток [1]. Другой причиной проявляемого интереса к слоям карбида кремния является его повышенная, по сравнению с другими непрямозонными полупроводниками, эффективность излучательной рекомбинации при комнатной температуре. В связи с этим пленки низкотемпературной кубической фазы карбида кремния, выращиваемые на кремнии и нашедшие уже ряд прак-

тических применений [2–4], в настоящее время также видятся весьма привлекательными для использования в качестве источников излучения ультрафиолетовой части оптического диапазона частот. Однако, многие вопросы, касающиеся как механизма роста слоев, так и понимания ряда особенностей, наблюдаемых на характеристиках карбидных структур, все еще остаются без ответа. Одной из таких проблем, в частности, является отсутствие полной ясности в причинах уширения и коротковолнового сдвига основной полосы излучения пленок кубической фазы карбида кремния при сохранении, в широком интервале частот, высокой эффективности их излучающей способности.

В большинстве выполненных работ [5] сдвиг спектральной полосы излучения 3C-SiC слоев в ультрафиолетовую область спектра связывается с изменением их зонной структуры вследствие проявления эффектов пространственного квантования. Попытки наблюдения в карбидных слоях квантово-размерных эффектов и реализации на их основе Блоховского генератора терагерцового диапазона частот [6] послужили причиной

повышенного внимания к разработке новых методов формирования на базе 3C-SiC тонкопленочных структур разнообразных наноструктурированных гетерокомпозиций с размерами кристаллитов в них нанометрового масштаба [7–10]. Разными способами, в том числе методами электрохимии, на различных подстилающих поверхностях изготавливались двумерные массивы 3C-SiC квантовых точек [5,7–9], квантовых нитей [10], а также сплошные слои нанопористого [5,7,8] и нанокристаллического [11] карбида кремния.

Целью настоящей работы являлось, используя специфику карбидообразования кремния в условиях пониженных ростовых температур с применением водородсодержащих соединений в качестве источников кремния и углерода, изучить особенности роста и кристаллической структуры микроостровков 3C-SiC, наращиваемых на предварительно карбидизированную поверхность Si(100). Интерес представляет также изучение влияния поверхностных напряжений на вид формируемых на начальной стадии роста островковых образований, а также нахождение условий появления на ростовой поверхности микроостровков либо в виде отдельных монокристаллитов, либо в виде текстурированных поликристаллов. Существующие в современной литературе утверждения о проявлении в 3C-SiC нанокристаллитах эффектов размерного квантования [5,7–9] в основном основаны на данных люминесцентного анализа в оптическом диапазоне частот. Очевидно, однако, что установление истинных причин светоизлучающей в широком диапазоне длин волн способности слоев карбида кремния и наблюдение эффектов, связанных с пространственным ограничением носителей заряда в микрокристаллитах карбида кремния, требует более тщательного изучения как механизмов фотолюминесценции структур, так и других характеристик карбидных слоев.

2. Технология роста и структура поверхности эпитаксиального 3C-SiC слоя

В качестве объекта исследования нами выбраны двумерные массивы островков кубической фазы карбида кремния, выращиваемые из смеси силана (SiH_4) с гексаном (C_6H_{14}) в вакуумной ростовой установке (предельный вакуум соответствовал давлению остаточных газов в реакторе $\geq 10^{-7}$ Torr) при пониженных (от 600°C до 800°C) температурах на поверхности предварительно карбидизированного с использованием только источника углеводорода слоя Si(100). Карбидизация поверхности традиционно осуществляется путем замещения атомами углерода части атомов Si в кристаллической решетке кремния. В литературе данный метод наращивания слоев известен как метод замещения атомов, если используется атомарный поток углерода [12,13], как метод химической конверсии при использовании источника углеводородов [14–16], и как метод самосборки с

участием дилатационных диполей при взаимодействии кремниевой поверхности с молекулами CO [17]. Соответствующие механизмы и модели начальной стадии высокотемпературной карбидизации поверхности кремния и последующего роста сплошного карбидного слоя обсуждались в работах [4,12,17–21]. Использование при карбидизации поверхности кремния пониженных ростовых температур препятствует формированию встречных от подложки диффузионных потоков атомов кремния, улучшая, тем самым, не только морфологию внешней поверхности тонкого карбидизированного слоя, но и затрудняя образование макродефектов в виде пор под карбидной пленкой, сохраняя высокую степень упругих напряжений в ней. Последующий рост массива островков карбида кремния осуществлялся из смеси паров гексана с силаном. Парциальные давления газов в реакторе установки выбирались в интервале от 0.01 до 1 mTorr. Использование в ростовых экспериментах смеси гидрида с углеводородом при одновременно низкой температуре эпитаксии приводило к резкому снижению скорости роста и уменьшению вероятности одновременного зарождения на поверхности большого количества островков. Повышение температуры подложки и давления газов в реакторе способствовало зарождению на ростовой поверхности большего количества островков, разрастание которых в дальнейшем приводило к формированию сплошной микрокристаллической пленки. Фазовый состав, кристаллическая структура и другие характеристики выращиваемых сплошных карбидных пленок обсуждались в [16,19,22].

Используя методы оптической, электронной и ионной растровой микроскопии, проследим характер изменения морфологии поверхности 3C-SiC/Si(100) структуры на разных, определяемых только температурой процесса, стадиях зарождения индивидуальных островков и их разрастания на поверхности тонкого сплошного подстилающего слоя карбида кремния. Зависящие от температуры осаждения слоя плотность, а также механизм зарождения и характер разрастания отдельных 3C-SiC островков на поверхности карбидизированного слоя кремния, показаны на рис. 1. Кристаллическая структура отдельного изолированного островка подтверждается соответствующими электронограммами (рис. 2, *c*, *d*). Исследования морфологии поверхности структур, полученных при одинаковых величинах потоков газов, но при разных значениях температуры подложки, показывают, что морфология поверхности карбидной пленки в ходе проведения ростового процесса непрерывно меняется. В ходе эпитаксиального наращивания пленки имеет место увеличение размеров отдельных микрокристаллических образований от десятка нанометров у основания фигур роста до нескольких микрон. Одновременно на ростовой поверхности наблюдается зарождение новых островков, приводящее к повышению их плотности. Скорости зарождения и разрастания островков определяются скоростью поступления атомов кремния и углерода на эпитаксиальную поверхность. При низкой температу-

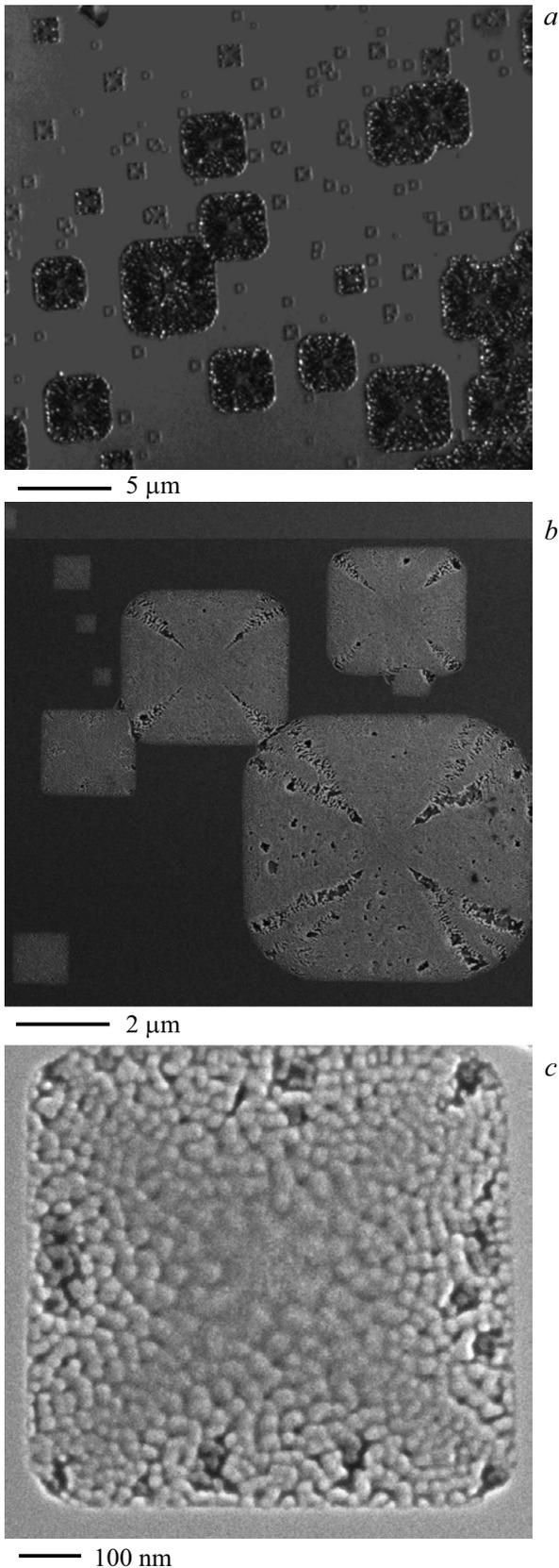


Рис. 1. Снимки, полученные методами оптической (*a, b*) и ионной (He) в отраженном пучке микроскопии с поверхности 3C-SiC островковой пленки, выращенной на подложке Si(100).

ре гетероэпитаксии плотность зарождающихся островков с наибольшей вероятностью связана с атомами Si и C из адсорбируемых ростовой поверхностью молекул рабочих газов. Форма отдельных достаточно развитых микроостровков на ростовой поверхности, полученная методом оптической интерференционной микроскопии, показана на рис. 2, *b*. Высота наиболее развитых островков может достигать в высоту нескольких сотен нанометров. В сильно напряженной 3C-SiC/Si(100) системе на поверхности слоя, наряду с островковыми морфологическими образованиями, характерными для плоскости [100] (рис 1), наблюдаются также фигуры роста более сложной формы (рис. 2, *a, b*). Последние в основном возникают вдоль линий проскальзывания кристаллических плоскостей, связанных с выходом дислокаций несоответствия на поверхность. Локализация вдоль дислокаций полей упругой деформации приводит к формированию на поверхности структуры фигур роста, вид которых может сильно отличаться от стандартной прямоугольной формы. Снимки отдельных островков, полученные методами сканирующей электронной и гелиевой (He) ионной микроскопии, демонстрируют также наличие у каждого микрокристаллического островка более тонкой кристаллической структуры (рис. 1, *c*). Каждый отдельный крупный островок 3C-SiC/Si(100) является текстурированным поликристаллом с размером зерен в плоскости пленки нанометрового (менее 50 nm) масштаба. На стадии зарождения островка, однако, вполне можно ожидать, что образование кристаллических зародышей на поверхности подстилающего карбидного слоя происходит по механизму Вольмера–Вебера. Дальнейший рост микрокристаллического островка вследствие накопления в нем упругих напряжений приводит, однако, не к образованию дислокаций несоответствия, как это имеет место, например, в системе Ge/Si [23], а к разориентации отдельных атомных плоскостей и формированию границ зерен. На сегодняшний день, однако, остается не выясненным характерный размер зарождающегося на ростовой поверхности островка, при котором, возможно, происходит переход от одного механизма роста с формированием монокристаллической структуры островка к другому колончатому механизму с образованием в объеме островка текстурированного поликристалла.

Интерес к подобного рода гетерокомпозициям связан с тем, что поликристаллическая плотноупакованная структура поверхностной фигуры роста с размером зерен в плоскости островка нанометрового масштаба представляет собой естественную двумерную сверхрешетку [24,25]. Примером подобных систем с дополнительным двумерным поверхностным потенциалом могут служить, в частности, фотонные кристаллы на базе нанопористых материалов, получаемые методами электрохимии, либо на базе эпитаксиальных структур с массивами упорядоченных квантовых точек [24]. Для ряда карбидных фаз это особенно актуально в связи с экспериментальным наблюдением в карбидных слоях

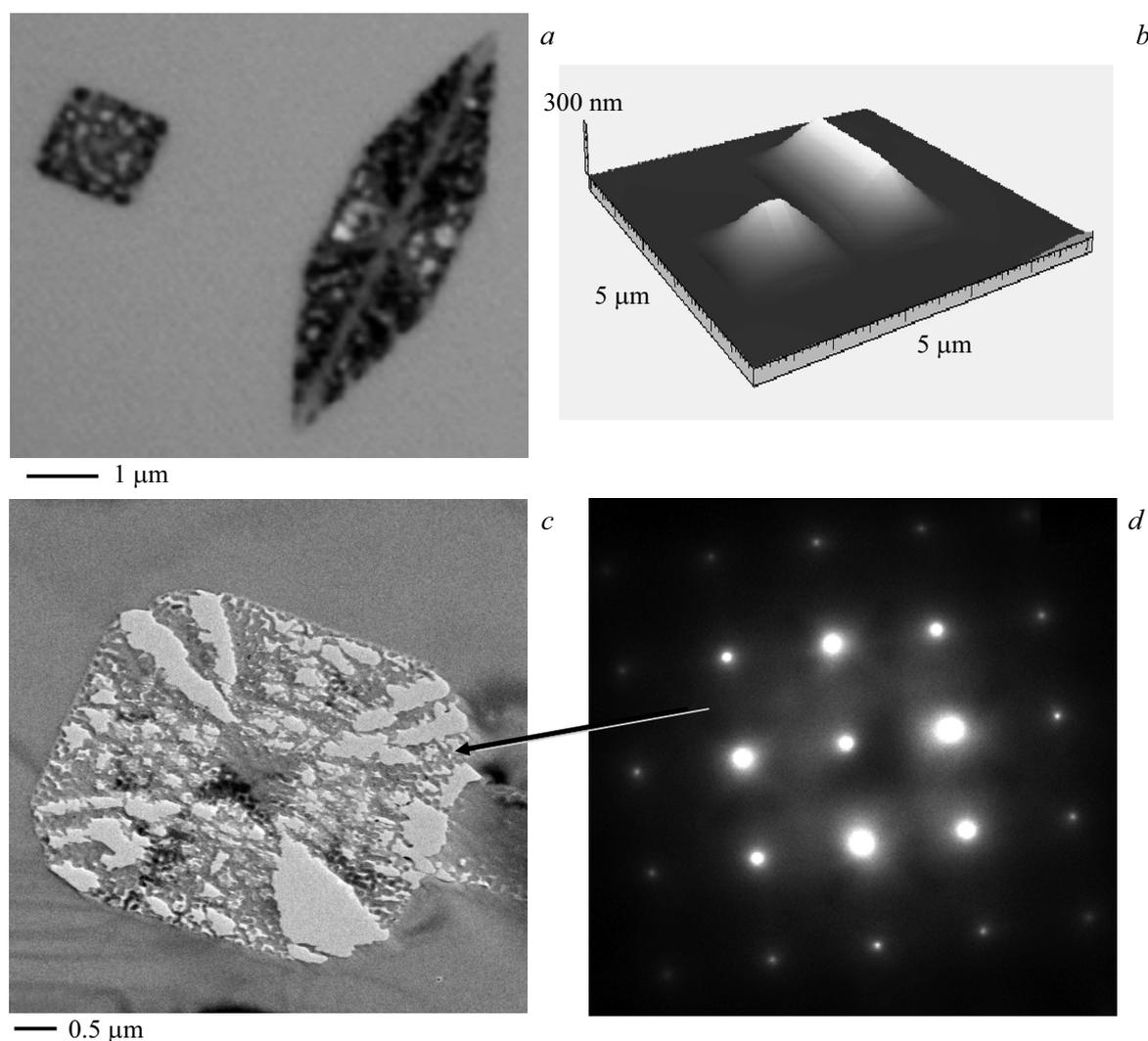


Рис. 2. Микроскопические двумерные (*a, c*) и трехмерное (*b*) изображения отдельных островков (*a–c*), формируемых на поверхности структуры 3C-SiC/Si(100). Снимки получены методами оптической (*a*), оптической интерференционной (*b*) и растровой электронной (*c*) микроскопии; (*d*) электронограмма отдельного микрокристаллического островка.

эффектов, связываемых с присутствием в структуре дополнительного периодического потенциала [26]. Среди них наиболее обсуждаемыми являются гексагональные и ромбоэдрические фазы карбида кремния, для которых характерно присутствие дополнительных длиннопериодных осей вращательной симметрии, обуславливающих появление в кристалле потенциала сверхрешетки [27]. В кристаллах кубической симметрии, где подобные элементы симметрии отсутствуют, возможно, однако, формирование в плоскости 3C-SiC слоя двумерной поверхностной сверхрешетки, связанной с его поликристаллической структурой. Присутствие в кристалле дополнительной сверхструктуры может приводить к появлению на его характеристиках дополнительных нетривиальных особенностей. Примером может служить, например, появление набора дополнительных колец на электронограммах слоев 3C-SiC, наблюдаемых, в частности, в работах [28,29]. Необходимо отметить, что впервые на

возможность формирования периодической сверхструктуры в поликристаллическом кремнии, объясняющей высокие, по сравнению с монокристаллами, измеряемые значения фотоэдс, указывалось еще в работе [30].

3. Спектры катодолуминесценции островковой пленки карбида кремния

В последние два десятилетия, в связи с задачами оптоэлектроники, наблюдается повышенный интерес к светоизлучающим свойствам наноструктурированных гетерокомпозиций на основе карбида кремния [1,7–11,31–34]. Большинство работ, выполненных с использованием микрокристаллических 3C-SiC пленок, демонстрировали эффективное смещение максимума спектральной полосы излучения в область ко-

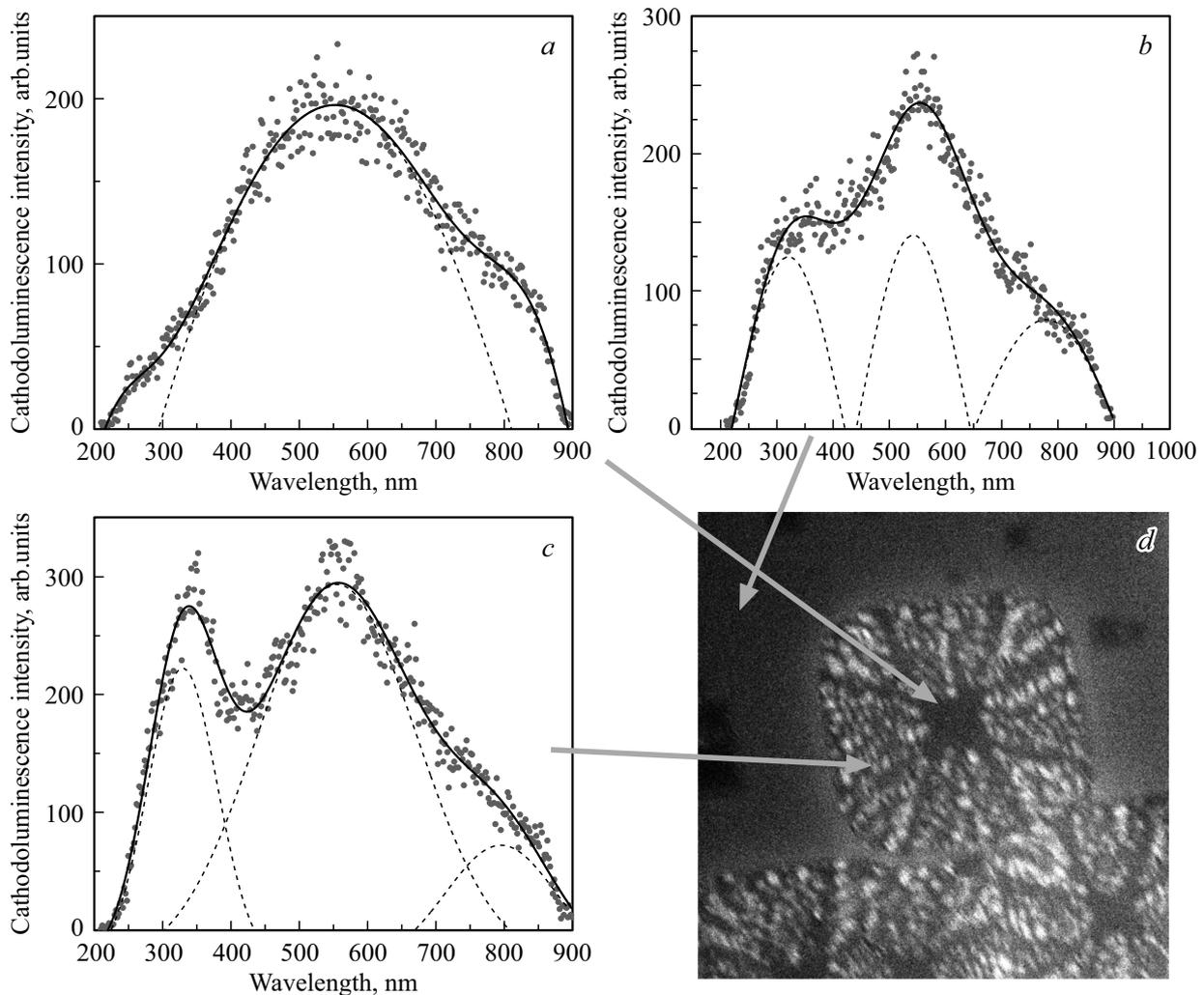


Рис. 3. Кристаллическая структура островка (*d*) и спектры катодолуминесценции (*a–c*), снятые с различных областей 3C-SiC поверхности.

ротких длин волн (вплоть до 350 nm) при ширине запрещенной зоны ненапряженного карбида кремния $E_g(3C-SiC) \approx 2.4 \text{ eV}$ ($\lambda_{\text{max}} = 520 \text{ nm}$) [1]. В литературе наблюдаемый в пленках 3C-SiC сдвиг полосы излучения в ультрафиолетовый диапазон частот довольно часто связывают с проявлением эффекта размерного квантования в нанокристаллитах, входящих в состав 3C-SiC пленки [5,7]. Однако слабая зависимость положения и структуры линий в наблюдаемых спектрах от способа приготовления образцов и размеров нанокристаллитов в них указывает на возможное участие в излучательной рекомбинации также и других механизмов.

В связи с затруднениями, возникающими при интерпретации поведения линий в спектрах фотолюминесценции, в настоящей работе нами рассмотрены спектры катодолуминесценции (КЛ) от поверхности островковой карбидной пленки при возбуждении ее электронной подсистемы ионным пучком гелиевого (He) растрового микроскопа. Спектры КЛ, снятые при комнатной температуре от разных участ-

ков поверхности 3C-SiC/Si(100) структуры в окрестности отдельного микроостровка (рис. 3, *d*), приведены на рис. 3, *a–c*. Спектры КЛ на рис. 3, *a–c* содержат основную линию с максимумом на длине волны $\lambda_1^{\text{max}} \approx (550 \pm 5) \text{ nm}$ ($E_1 = E_g(3C-SiC) \approx 2.25 \text{ eV}$), соответствующую краю фундаментальной полосы поглощения кубической фазы карбида кремния (переходы между состояниями $X_1-\Gamma_{15}$ зоны Бриллюэна). Данная линия характеризуется сильным уширением, вероятнее всего связанным с неоднородными деформациями в плоскости структуры, и присутствует в спектрах КЛ как от подстилающего монокристаллического карбидизированного слоя кремния (рис. 3, *b*), так и от разных участков поверхности отдельного микроостровка (рис. 3, *a, c*). Выявляемая при низких температурах тонкая структура линий [35], сдвигающая основную полосу фотолюминесценции в область ближнего ультрафиолета, в наблюдаемых спектрах катодолуминесценции (рис. 3) из-за высокой температуры проводимых измерений в явном виде не проявляется. Однако использование для возбуж-

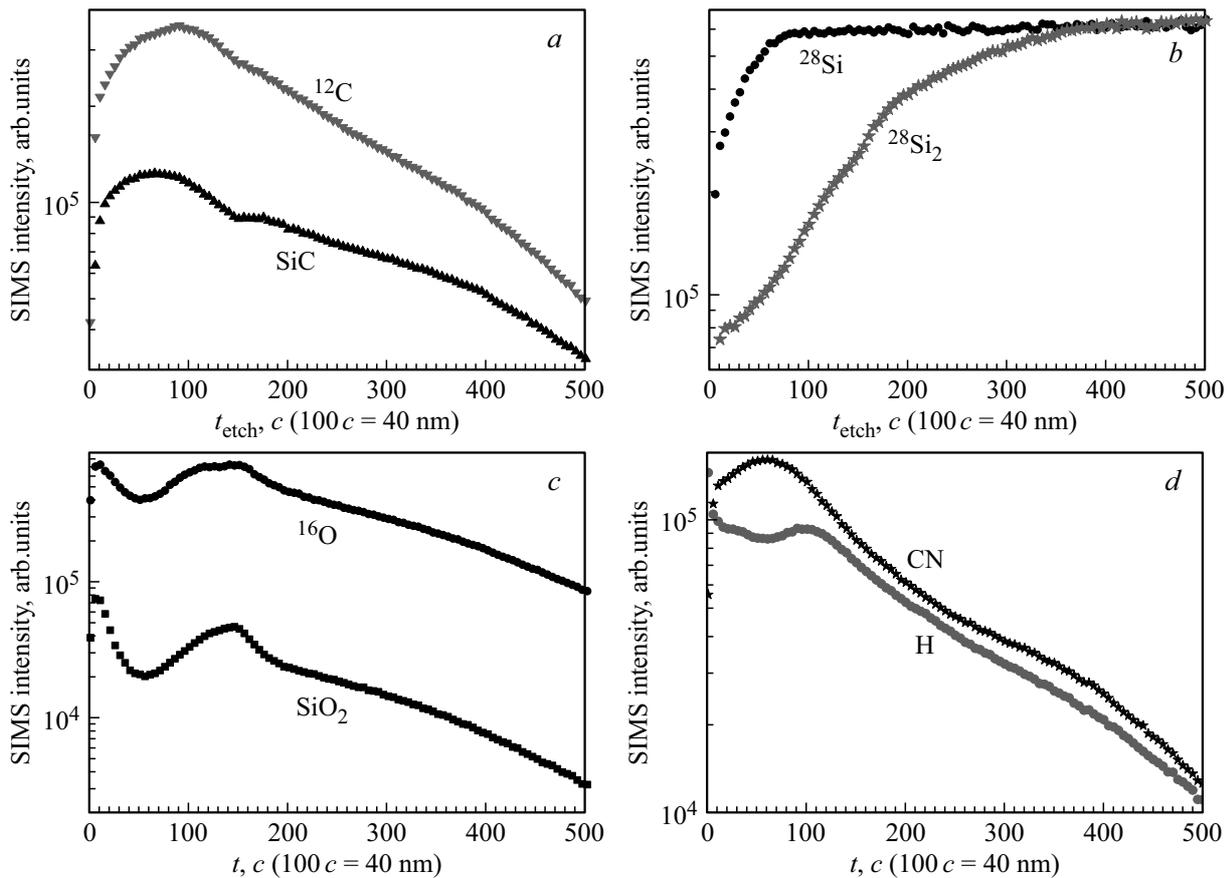


Рис. 4. Распределение по глубине структуры элементов, входящих в состав пленки 3C-SiC/Si(100).

дения электронной подсистемы ионного пучка позволило выявить в спектре излучения исследуемых структур присутствие двух дополнительных полос с максимумами в окрестности длин волн $\lambda_2^{\max} \approx (325 \pm 5) \text{ nm}$ ($E_2 \approx 3.8 \text{ eV}$) и $\lambda_3^{\max} \approx (800 \pm 20) \text{ nm}$ ($E_3 \approx 1.55 \text{ eV}$).

Полоса излучения в окрестности длин волн λ_3^{\max} впервые наблюдалась в спектрах фотолюминесценции слоев SiO_2 , содержащих нанокристаллиты карбида кремния [36]. Последние, размером 1–2 nm, формировались в слое диоксида кремния имплантацией ионов Si и C. С ростом дозы имплантируемых ионов размер нанокристаллитов увеличивался, что приводило к сдвигу положения максимума излучения на длине волны λ_3^{\max} . Наблюдаемый пик фотолюминесценции, равно как и его смещение в коротковолновую область спектра в процессе отжига, в [36] связывались с эффектом размерного квантования в образующихся в SiO_2 пленке нанокристаллитах кремния. Более доскональное изучение природы линии излучательной рекомбинации с длиной волны λ_3^{\max} проведено в работе [37] на структурах, содержащих нанокристаллиты SiC диаметром 10–20 nm, получаемые при осаждении на поверхность сапфира атомов углерода и кремния из ионных пучков с последующим отжигом в атмосфере кислорода. На основании изучения зависимости интенсивности соответствующей

линии от длительности отжига структур в атмосфере кислорода было установлено, что более вероятной причиной проявления наблюдаемой полосы люминесценции являются электронные излучательные переходы между состояниями, связанными с Si–O связями в пограничной (между SiC нанокристаллитами и диоксидом кремния) области. В нашем случае (нами рассматриваются эпитаксиальные структуры, полученные с использованием вакуумной гидридной технологии, а не массивы SiC нанокристаллитов в SiO_2 матрице) наблюдаемую на длине волны λ_3^{\max} линию излучения (рис. 3) также можно связать с присутствием в образцах кислорода. Это следует, в частности, из анализа распределения по глубине состава слоев в структуре 3C-SiC/Si на базе данных вторичной ионной масс-спектрометрии (ВИМС), представленных на рис. 4. Появление в растущем карбидном слое наряду с азотом атомов кислорода с образованием SiO_2 включений можно объяснить присутствием в реакторе используемой установки высокого уровня остаточных атмосферных газов. Наблюдаемое накопление кислорода в окрестности гетерограницы (рис. 4, c) связано с эффектом вытеснения кислорода из слоя 3C-SiC на стадии карбидизации поверхности пластины кремния. При этом, согласно рис. 4, c, d, концентрация водорода в слоях остается ниже концентрации кислорода, вследствие чего

полной пассивации оборванных кислородных связей в структуре не происходит.

Наиболее привлекательной для приложений на рис. 3 видится полоса излучения с энергией E_2 в максимуме, сдвинутая в область дальнего ультрафиолета. Впервые данная полоса излучения наблюдалась без обсуждения при 77 К в спектрах катодолуминесценции нанопористого (с размерами промежутков между нанопорами 10–100 nm) гексагонального 6H-SiC карбида кремния в работе [38]. Соответствующая линия в спектрах фотолуминесценции водного раствора, содержащего нанокристаллиты 3C-SiC размером 1–6 nm, полученных путем электрохимического растравливания 3C-SiC слоя, обсуждалась также в работе [9]. В сплошных поликристаллических текстурированных пленках 3C-SiC, выращенных на Si(111) [11] и в нанокристаллических SiC пленках, осаждаемых на сапфире из ионных пучков [37], данная линия в спектрах фотолуминесценции наблюдалась с использованием для возбуждения электронной подсистемы карбидного слоя излучения третьей гармоники титан-сапфирового фемтосекундного лазера. На сегодняшний день предложены различные механизмы (связанные с квантованием спектра электронов [5,9], либо с наличием в структуре светоизлучающих центров как в объеме пленки [11], так и на границах кристаллитов карбида кремния [37]), которые могли бы отвечать за появление данной линии в спектре излучательной рекомбинации рассматриваемых гетерокомпозиций. Анализ представленных в литературе данных не показывает, однако, наличия явно выраженных закономерностей, которые бы с высокой степенью надежности указывали на проявление при комнатной температуре выраженного квантования спектра электронов в системе с SiC нанокристаллитами. Очевидно также, что заметное влияние на структуру энергетических зон, а соответственно и на положение спектральных линий в наблюдаемых спектрах могут оказывать и другие факторы, например, упругие напряжения, которые в системе SiC/Si из-за большой разницы параметров кристаллических решеток Si и SiC могут быть довольно значительными.

Из вида кривых, показанных на рис. 5, *a*, следует, что наряду с оптическими переходами с энергией E_1 , связанных с X_1 – Γ_{15} переходами с возможным участием примесных центров в микрокристаллитах карбидной пленки [33], в системе также возможно наблюдение излучательных переходов с энергией E_2 , связанных, как один из вариантов, с возбуждением локальных центров в окрестности гетерограницы. Обсудим возможную природу появления в эпитаксиальных 3C-SiC слоях полосы излучения, сдвинутой в дальнюю ультрафиолетовую область спектра (с энергией E_2 в максимуме излучения). Как следует из рис. 3 соответствующая спектральная полоса в спектрах КЛ характеризуется наибольшей силой осциллятора при облучении пучком ионов граней микроостровка. Интенсивность данной линии заметно ослабляется при смещении возбуждающего пучка ионов к центру островка (рис. 3, *a*). Структура и положение

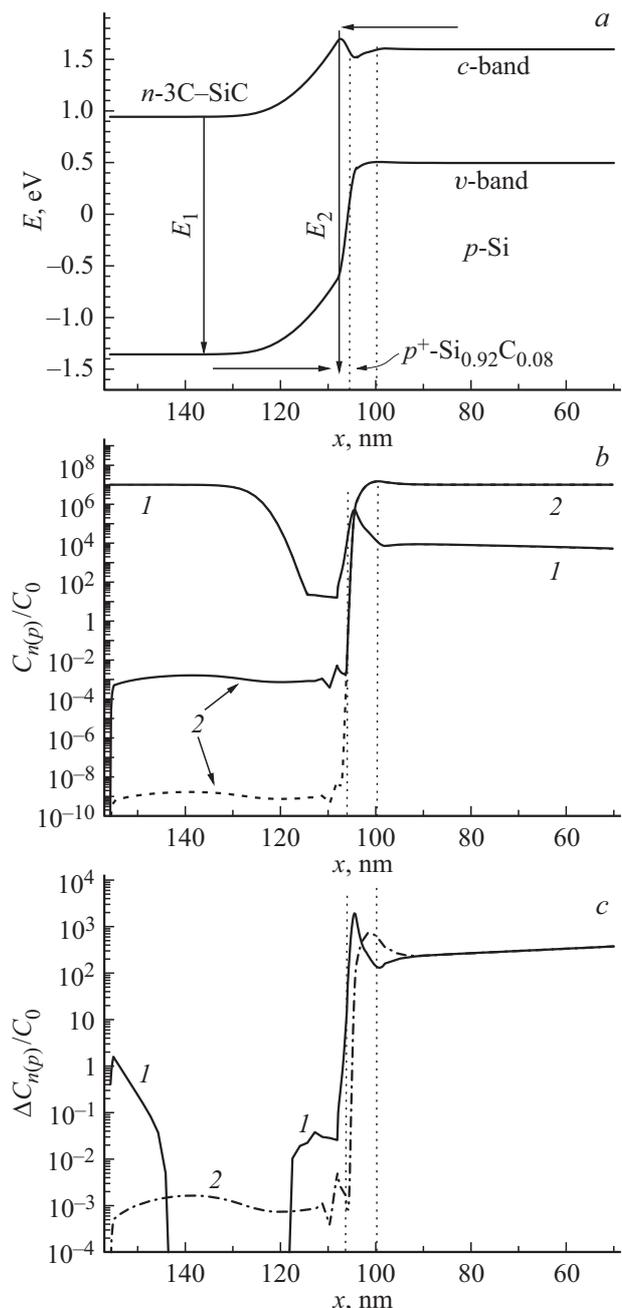


Рис. 5. Структура зон (*a*) и распределение (*b*) по слоям структуры электронов (C_n/C_0 — кривая 1) и дырок (C_p/C_0 — кривая 2) в отсутствие ($F_0 = 10^{-3}$ — штриховые линии) и при наличии ($F_0 = 10^3$ — сплошные линии) возбуждения; (*c*) распределение по слоям структуры концентрации неравновесных электронов ($\Delta C_n/C_0$ — кривая 1) и дырок ($\Delta C_p/C_0$ — кривая 2).

линий в спектре катодолуминесценции (рис. 3, *b*) от тонкого карбидизированного слоя Si (гладкие области на рис. 3, *d*, 1, 2, *a*–*c*) идентифицируется со структурой линий в спектрах катодолуминесценции от разных участков отдельного микроостровка, входящего в состав пленки (рис. 3, *a*, *c*), указывая на общность механизмов

их обуславливающих. В соответствии с проведенными наблюдениями рассмотрим наиболее вероятный, на наш взгляд, механизм появления в спектре излучательной рекомбинации карбидной пленки линии на длине волны $\lambda_2 \approx 320$ nm. Для этого рассмотрим структуру потенциала и характер распределения неравновесных носителей заряда в окрестности n -3C-SiC/ p^+ -Si $_{1-x}$ C $_x$ / p -Si гетероперехода. Предполагалось, что между карбидным слоем и кремниевой подложкой формируется промежуточный слой твердого раствора Si $_{1-x}$ C $_x$ с повышенным содержанием акцепторных центров, связанных с дефектами в окрестности гетерограницы. Образование на гетерогранице со стороны кремния значительного количества точечных дефектов, вплоть до формирования микропор, на сегодняшний день надежно установлено в различных экспериментах [19,39–41]. В соответствии со сказанным ниже при расчетах для рассматриваемой системы выбирались следующие значения легирующей примеси в отдельных слоях $N_D(3C-SiC) = 2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $N_A(Si_{1-y}C_y) = 9 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $N_A(Si) = 2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Повышенное содержание структурных дефектов и кислорода (рис. 4) на границе может приводить к появлению светоизлучающих центров, связанных с возбуждением кислородных Si–O и Si–C–O связей [42]. На возможное участие кислорода в формировании этих центров указывает и зависимость интенсивности наблюдаемой на длине волны λ_2^{max} линии от длительности отжига в атмосфере кислорода наноструктурированных SiC гетерокомпозиций [37]. Накапливаемые в поле пространственного заряда гетероперехода неравновесные носители заряда набирают в поле p – n -перехода дополнительную энергию, захватываясь на состояния этих центров, и рекомбинируют с испусканием фотона с энергией $E_2 > E_g(3C-SiC) + E_g(Si)$. Такую возможность наглядно демонстрируют результаты расчета структуры энергетических зон, представленные на рис. 5, *a*. Здесь же показан характер распределения по слоям диодной структуры концентраций носителей заряда в отсутствие ($F_0 = 10^{-3}$) и при наличии ($F_0 = 10^2$) возбуждения (рис. 5, *b*), а также характер распределения возбуждаемых пучком неравновесных электронов и дырок (рис. 5, *c*). Расчеты, по аналогии с работой [43], проведены при комнатной температуре численным методом на базе уравнения Пуассона и уравнений квазигидродинамики.

Участие в излучательной рекомбинации локализуемых в окрестности гетерограницы ловушек, подтверждается также сильным ослаблением линии с энергией E_2 в спектре излучения поверхности центральной части островка (рис. 3, *a*). Последняя расположена на довольно значительном (несколько десятых долей микрона (рис. 2, *b*)) расстоянии от гетерограницы, обуславливая сильное поглощение выходящего с поверхности структуры сигнала. Необходимо также заметить, что присутствие на гетерогранице зарядовых состояний приводит, аналогично тому как это наблюдается в частично релаксированной по упругим напряжениям

системе Si/SiGe [44], к искажению формы потенциала в окрестности гетероперехода. Образование дополнительного барьера в окрестности гетерограницы, связанного с зарядовыми центрами демонстрирует и структура зон, показанная на рис. 5, *a*. Некоторую неопределенность вносит и неоднозначность выбора значений разрывов зон $\Delta E_{v,c}$ на гетерогранице 3C-SiC/Si. Единственно, что сегодня надежно установлено на основании измерений электронного сродства кремния и карбида кремния, это значительная разница в разрывах валентной зоны и зоны проводимости $\Delta E_v = |E_v(3C-SiC) - E_v(Si)| \gg \Delta E_c$. Абсолютная величина параметра ΔE_v , чаще всего определяемая из электрических измерений, в разных работах варьируется в границах от 0.8 eV [45,46] до 1.03 eV [47]. Зарядовые состояния на границе, наряду с упругими деформациями, могут, однако, довольно сильно изменить эту величину, что, соответственно, будет сказываться и на положении спектральной линии с длиной волны λ_2 в максимуме.

4. Заключение

Прослежен характер зарождения в ходе эпитаксиального процесса и разрастания 3C-SiC островковых формирований на карбидизированной поверхности кремния. Впервые продемонстрирована нанокристаллическая структура развитых микроостровков и влияние на их форму поверхностных деформаций. Сопоставление спектров катодolumинесценции от различных участков поверхности показало идентичность наблюдаемых спектров от поверхностного карбидизированного слоя Si и от различных участков отдельного 3C-SiC островка. В спектрах эпитаксиальных 3C-SiC/Si(100) структур впервые наряду с основной линией обнаружены дополнительные спектральные линии, сдвинутые в красную и ультрафиолетовую области спектрального диапазона. Сопоставительный анализ поведения линий в наблюдаемых люминесцентных спектрах продемонстрировал их явную зависимость от содержания кислорода на границе между 3C-SiC слоем и кремниевой подложкой. Участие пограничных состояний в излучательных рекомбинационных процессах подтверждается также расчетом структуры зон в условиях повышенной плотности заряда дефектов на гетерогранице между слоями.

Благодарности

Авторы публикации выражают благодарность М.Н. Дроздову (ЦКП ИФМ РАН) за снятие ВИМС спектров, а также сотрудникам Междисциплинарного ресурсного центра по направлению „Нанотехнологии“ СПбГУ и центра коллективного пользования ИФП СО РАН за оказанное содействие при проведении микроскопических и люминесцентных исследований.

Финансирование

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-42-520062.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] А.А. Лебедев, А.М. Стрельчук, С.Ю. Давыдов, А.Е. Черенков, А.Н. Кузнецов, А.С. Трегубова, Л.М. Сорокин, М.П. Щеглов, А.В. Садохин, С. Ионеда, Ш. Нишино. *ФТП* **40**, 1432 (2006).
- [2] K.W. Ang, K.J. Chui, V. Bliznetsov, C.H. Tung, A. Du, N. Balasubramanian, G. Samudra, M.F. Li, Y.C. Ye. *Appl. Phys. Lett.* **86**, 093102 (2005).
- [3] W.T. Hsieh, Y.K. Fang, W.J. Lee, C.W. Ho, K.H. Wu, J.J. Ho. *Electr. Lett.* **36**, 1869 (2000).
- [4] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов, Н.А. Феоктистов. *ФТТ* **56**, 1457 (2014).
- [5] J.Y. Fan, X.L. Wu, P.K. Chu. *Progr. Mater. Sci.* **51**, 983 (2006).
- [6] В.И. Санкин, И.А. Столичнов. *Письма в ЖЭТФ* **64**, 105 (1996).
- [7] J. Zhu, Z. Liu, X.L. Wu, L.L. Xu, W.S. Zhang, P.K. Chu. *Nanotechnology* **18**, 365603 (2007).
- [8] T.L. Rittenhouse, P.W. Bohn, T.K. Hossain, I. Adesida, J. Lindsay, A. Marcus. *J. Appl. Phys.* **95**, 490 (2004).
- [9] X.L. Wu, J.Y. Fan, T. Qiu, X. Yang, G.G. Siu, P.K. Chu. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 026102 (2005).
- [10] L. Zhang, W. Yang, H. Jin, Z. Zheng, Z. Xie, H. Miao, L. An. *Appl. Phys. Lett.* **89**, 143101 (2006).
- [11] Л.К. Орлов, Ю.Н. Дроздов, Н.А. Алябина, Н.Л. Ивина, В.И. Вдовин, И.Н. Дмитрук. *ФТТ* **51**, 446 (2009).
- [12] M. Kitabatake, M. Deguchi, T. Hirao. *J. Appl. Phys.* **74**, 4438 (1993).
- [13] Z.I. Liu, J.F. Liu, P. Ren, P.S. Xu. *J. Phys.: Conf. Ser.* **100**, 042040 (2008).
- [14] I.H. Khan, R.H. Summergrad. *J. Vac. Sci. Technol.* **4**, 327 (1967).
- [15] T. Yoshinobu, H. Mitsui, Y. Tarui, T. Fuyuki, H. Matsunami. *J. Appl. Phys.* **72**, 2006 (1992).
- [16] Л.К. Орлов, Ю.Н. Дроздов, В.Б. Шевцов, В.А. Боженкин, В.И. Вдовин. *ФТТ* **49**, 596 (2007).
- [17] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. *ФТТ* **50**, 1188 (2008).
- [18] R. Anzalone, A. Severino, G.D' Arrigo, C. Bongiorno, G. Abbondanza, G. Foti, S. Sadow, F. La Via. *J. Appl. Phys.* **105**, 084910 (2009).
- [19] Л.К. Орлов, Э.А. Штейнман, Т.Н. Смыслова, Н.Л. Ивина, А.Н. Терещенко. *ФТТ* **54**, 666 (2012).
- [20] C.S. Roper, V. Radmilovic, R.T. Howe, R. Maboudian. *J. Appl. Phys.* **103**, 084907 (2008).
- [21] А.А. Лебедев, С.Ю. Давыдов. *ФТП* **39**, 296 (2005).
- [22] Л.К. Орлов, Ю.Н. Дроздов, М.Н. Дроздов, О.А. Подъячева, В.И. Вдовин. *Журн. структурн. химии* **51**, S148 (2010).
- [23] A.I. Nikiforov, V.V. Ulyanov, R.A. Shaiduk, S.A. Teys, F.K. Gutakovsky, O.P. Pchelyakov. *Int. J. Nanosci.* **6**, 297 (2007).
- [24] И.А. Дмитриев, Р.А. Сулис. *ФТП* **36**, 1460 (2002).
- [25] M.L. Orlov, Yu.A. Romanov, L.K. Orlov. *Microelectronics J.* **36**, 396 (2005).
- [26] В.И. Санкин, А.А. Лепнева. *ФТП* **34**, 831 (2000).
- [27] Г.Б. Дубровский, Ю.В. Погорельский. *ФТП* **8**, 819 (1974).
- [28] Л.К. Орлов, Ю.Н. Дроздов, В.И. Вдовин, Ю.И. Тарасова, Т.Н. Смыслова. *ФТТ* **51**, 1018 (2009).
- [29] F.M. Morales, Ch. Zgheib, S.I. Molina, D. Araujo, R. Garcia, C. Fernandez, A. Sanz-Hervas, P. Weih, Th. Stauden, V. Cimalla, O. Ambacher, J. Pezoldt. *Phys. Status Solidi C* **1**, 341 (2004).
- [30] В.И. Стафеев. *ФТП* **5**, 408 (1971).
- [31] H.W. Shim, K.C. Kim, Y.H. Seo, K.S. Nahm, E.K. Suh, H.J. Lee, Y.G. Hwang. *Appl. Phys. Lett.* **70**, 1757 (1997).
- [32] J.N. Wang, Z.M. Chen, P.W. Woo, W.K. Ge, Y.Q. Wang, M.B. Yu. *Appl. Phys. Lett.* **74**, 923 (1999).
- [33] A.A. Porporati, K. Hosokawa, W. Zhu, G. Pezzotti. *J. Appl. Phys.* **100**, 093508 (2006).
- [34] H. Shen, T. Wu, Yu. Pan, L. Zhang, B. Cheng, Z. Yue. *Thin Solid Films* **522**, 36 (2012).
- [35] Л.К. Орлов, Э.А. Штейнман, Н.Л. Ивина, В.И. Вдовин. *ФТТ* **53**, 1706 (2011).
- [36] A. Perez-Rodrigues, O. Gonzales-Varona, B. Garrido, P. Pellegrino, J.R. Morante, C. Bonafos, M. Carrada, A. Claverie. *J. Appl. Phys.* **94**, 254 (2003).
- [37] A.V. Semenov, A.V. Lopin, V.M. Puzikov, O.M. Vovk, I.N. Dmitruk, V. Romano. *Thin Solid Films* **520**, 6626 (2012).
- [38] J.S. Shor, L. Bemis, A.D. Kurtz, I. Grimberg, B.Z. Weiss, M.F. MacMillian, W.J. Choyke. *J. Appl. Phys.* **76**, 4045 (1994).
- [39] C. Wen, Y.M. Wang, W. Wan, F.H. Li, J.W. Liang, J. Zou. *J. Appl. Phys.* **106**, 073522 (2009).
- [40] F.M. Morales, S.I. Molina, D. Araujo, R. Carcia, V. Cimalla, J. Pezoldt. *Diamond Rel. Mater.* **12**, 1227 (2003).
- [41] R. Goswami, C.H. Li, G.G. Jernigan, P.E. Thompson, C.S. Hellberg, B.T. Jonker. *Acta Mater.* **65**, 418 (2014).
- [42] А.П. Барабан, В.А. Дмитриев, Ю.В. Петров, К.А. Тимофеева. *ФТТ* **54**, 1080 (2012).
- [43] Л.К. Орлов, В.И. Вдовин, Н.Л. Ивина, Э.А. Штейнман, М.Л. Орлов, Ю.Н. Дроздов, В.Ф. Петрова. *Журн. структурн. химии* **55**, 1237 (2014).
- [44] L.K. Orlov, Z.J. Horvath, N.L. Ivina, V.I. Vdovin, E.A. Steinman, M.L. Orlov, Yu.A. Romanov. *Opto-Electron. Rev.* **11**, 169 (2003).
- [45] S. Nishikawa, H. Hashimoto, M. Chikamoto, K. Horikoshi, M. Aoki, K. Arima, Ju. Uchikosi, M. Morita. *Thin Solid Films* **508**, 385 (2006).
- [46] R. Rahimi, C.M. Miller, S. Raghavan, C.D. Stinespring, D. Korakakis. *J. Phys. D:* **42**, 055108 (2009).
- [47] K.H. Wu, Y.K. Fang, J.J. Ho, W.T. Hsieh, T.J. Chen. *IEEE EDL* **19**, 8, 294 (1998).

Редактор Т.Н. Василевская