

3,7

Исследование анизотропных упругопластических свойств пленок β -Ga₂O₃, синтезированных на подложках SiC/Si

© А.С. Гращенко¹, С.А. Кукушкин^{1-4,¶}, В.И. Николаев^{5,6}, А.В. Осипов^{1,3,4},
Е.В. Осипова¹, И.П. Сошников⁴

¹ Институт проблем машиноведения РАН,
Санкт-Петербург, Россия

² Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,
Санкт-Петербург, Россия

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

⁴ Санкт-Петербургский Академический университет,
Санкт-Петербург, Россия

⁵ ООО „Совершенные кристаллы“,
Санкт-Петербург, Россия

⁶ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

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

(Поступила в Редакцию 13 ноября 2017 г.)

Исследованы структурные и механические свойства пленок оксида галлия, выращенных на кремнии на кристаллографических плоскостях (001), (011) и (111) с буферным слоем карбида кремния. С помощью наноиндентирования исследованы упругопластические характеристики оксида галлия, а также определен параметр упругого восстановления исследуемых пленок. Методами квантовой химии рассчитаны предел прочности, твердость, тензор упругости, тензор податливости, модуль Юнга, коэффициент Пуассона и другие характеристики оксида галлия. Обнаружено, что кристалл оксида галлия является ауксетиком, поскольку при некоторых направлениях растяжения коэффициент Пуассона принимает отрицательные значения. Показано, что вычисленные значения количественно соответствуют экспериментальным данным. Сделан вывод о том, что упругопластические свойства пленок оксида галлия примерно соответствуют свойствам объемных кристаллов и что изменение ориентации поверхности кремния приводит к существенному изменению ориентации оксида галлия.

А.С. Гращенко, С.А. Кукушкин и А.В. Осипов выражают благодарность за финансовую поддержку РФФИ (грант № 14-12-01102). Экспериментальные результаты получены с использованием уникальной научной установки „Физика, химия и механика кристаллов и тонких пленок“ (ИПМаш РАН, Санкт-Петербург).

DOI: 10.21883/FTT.2018.05.45776.321

1. Введение

В связи с развитием тонкопленочных технологий в настоящее время активно ищутся новые пути получения высококачественных эпитаксиальных слоев широкозонных полупроводников и гетероструктур на их основе. В частности, в последнее десятилетие исследователи уделяют все большее внимание получению эпитаксиальных пленок соединения оксида галлия моноклинной сингонии β -Ga₂O₃. Этот полупроводниковый материал весьма перспективный, поскольку имеет ряд физических свойств, благодаря которым может составить конкуренцию таким материалам, как нитриды третьей группы. Оксид галлия имеет ширину запрещенной зоны 4.7 eV и остается прозрачным в ультрафиолетовой области спектра вплоть до 260 nm. Также β -Ga₂O₃ имеет высокое напряжение электрического пробоя и его легко легировать, что позволяет производить слои различной проводимости. На сегодняшний день известно

о создании на основе эпитаксиальных слоев β -Ga₂O₃ энергоэффективных светодиодов, полевых транзисторов, диодов Шоттки, УФ-фотодетекторов, газовых датчиков и показана возможность производства высоковольтных транзисторов [1–4]. Популярность данного материала подтверждается растущим числом публикаций на тему роста пленок β -Ga₂O₃ методами молекулярно-пучковой эпитаксии [1,5], эпитаксии из металлоорганических соединений [6], хлоридной эпитаксии [7,8] и другими. Одним из весьма эффективных способов роста эпитаксиальных слоев β -Ga₂O₃ является метод хлоридной эпитаксии HVPE, так как этот метод позволяет выращивать высококачественные пленки с высокой скоростью роста.

Основной подложкой для роста эпитаксиальных слоев β -Ga₂O₃ являются сапфировые пластины в связи с доступностью их на рынке. Но сапфир Al₂O₃ является диэлектриком, что весьма снижает потенциал электрических приборов, сделанных на основе структур β -Ga₂O₃/Al₂O₃. Наиболее эффективным для производ-

ства электрических приборов является сопряжение эпитаксиальных слоев $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ с кремнием Si, поскольку кремний был и остается на данный момент основным материалом электроники. Такая интеграция невозможна с помощью традиционных методов роста пленок $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, так как кремниевые подложки неустойчивы в условиях, при которых формируются слои $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ эпитаксиального качества. Это связано как с высокой температурой роста (больше 1000°C), так и с наличием кислорода, который провоцирует окисление приповерхностного слоя кремниевой подложки, на котором эпитаксиальные слои $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ не растут. Условия роста и методы получения слоев $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ подробно описаны в обзоре [8]. В работе [9] было предложено выращивать пленки $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ методом HVPE на кремниевых подложках с предварительно синтезированным на них буферным слоем карбида кремния SiC. Слой SiC формировали методом химического замещения атомов [10] на поверхности кремния. Некоторые свойства слоев SiC описаны в работах [11,12]. В настоящей работе было показано, что пленки $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, выращенные на структуре SiC на Si, имеют структуру, близкую к эпитаксиальной и состоят из чистой β -фазы.

2. Методика эксперимента

В настоящей работе изучены упругопластические и структурные свойства пленок $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, выращенных на буферном слое SiC на подложках кремния. Буферный слой SiC формировали на Si методом химического замещения атомов. Для синтеза пленок SiC использовали кремниевые подложки марок КЭФ 3.6-5.4, КДБ 50 и КОФ с кристаллографическими плоскостями (001), (011) и (111) соответственно. Подложки марок КЭФ и КОФ имели отклонение от базового направления на 4° , а подложка марки КДБ была без отклонения. Синтез SiC проводили в смеси монооксида углерода CO и силана SiH_4 при температуре 1250°C и давлением в реакторе 1, 4 и 0.6 Torr для подложек КЭФ, КДБ и КОФ соответственно. Время синтеза составляло 20 min для образцов с кристаллографическими плоскостями (001) и (111), а кремниевую подложку КДБ синтезировали 15 min. Пленки $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ выращивали методом HVPE по технике, описанной в работе [8]. Для роста был использован реактор, разработанный ООО „Совершенные кристаллы“, температура в зоне осаждения составляла 1050° . В настоящей работе методом наноиндентирования исследовалась система, состоящая из пленки $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, выращенной на подложках Si, на которых предварительно были выращены методом замещения атомов буферные слои SiC толщиной 60 nm для подложки Si с ориентацией (001), 80 nm для подложки Si с ориентацией (011) и 120 nm для подложки Si с ориентацией (111). Следует подчеркнуть, что кристаллическое качество слоя SiC на Si с ориентацией (001) было чуть выше, чем у остальных. Данные о толщине слоев SiC были получены из анализа эллипсометрических спектров, т. е. зависимо-

стей вещественной и мнимой частей диэлектрической проницаемости от энергии фотонов, полученных на эллипсометре VUV-WASE J.A. Woollam.

3. Результаты исследований

Исследования упругопластических характеристик пленок $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ проводили методом наноиндентирования на нанотестере NanoTest 600 фирмы MicroMaterials. Метод наноиндентирования является одним из наиболее перспективных методов изучения механических свойств кристаллов и их кристаллического качества как объемных материалов, так и тонких пленок [13–15]. Следует отметить, что в случае тонких пленок для получения наиболее корректных результатов измерения глубину проникновения индентора в исследуемый материал следует ограничить 10% от общей толщины пленки, так как это позволит исключить влияние подложки. Физическая сущность метода наноиндентирования заключается в том, что геометрически аттестованный индентор под действием заданного профиля нормальной силы $F(t)$ внедряется в исследуемый образец с одновременной регистрацией глубины погружения h . Этот метод позволяет построить кривые упругопластической деформации при нагрузке индентора и упругого восстановления материала при его разгрузке. Для исследования структуры пленок $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ были использованы методы атомно-силовой микроскопии АСМ и растровой электронной микроскопии РЭМ. Эти методы позволили визуализировать особенности как поверхности, так и внутренней структуры пленок $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$. Кристаллическое качество пленок $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ помимо метода наноиндентирования исследовали с помощью рамановской микроскопии. О качестве исследуемых пленок судили по анализу рамановских спектров, в частности, по наличию и интенсивности специфических для $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ центральных акустических и оптических мод, описанных в работе [9].

Целесообразнее всего исследовать упругопластические свойства путем определения их упругой жесткости в контакте C , твердости H и модуля упругости E . Это можно сделать с помощью анализа кривых наноиндентирования по методике Оливера–Фарра (МОФ) [16]. Наиболее информативной для МОФ является кривая упругого восстановления, поскольку тангенс угла наклона ее верхней части при максимальной глубине погружения индентора h_{\max} равен величине $C = (dF/dh)_{(h=h_{\max})}$. Величина C содержит информацию о контактной глубине $h_c = h - 0.75F_{\max}/C$ и соответственно о твердости материала $H = F_{\max}/24.5h_c^2$. Кроме того, величина C связана с приведенным модулем упругости $E' = \sqrt{\pi}C/9.9h_c$, который также определяется из соотношения $1/E' = (1 - \nu_s^2)/(1 - \nu_s^2)/E_s + (1 - \nu_i^2)/E_i$, где ν — коэффициент Пуассона, индексы s и i относятся к исследуемому материалу и материалу индентора соответственно [13].

Для исследования упругопластических свойств пленок $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ на подложках Si/SiC был использован алмазный

индентор Берковича, имеющий форму равносторонней трехгранной пирамиды с радиусом закругления наконечника 100 nm. Скорости нагрузки и разгрузки индентора были равны 0.5 и 1 mN/s соответственно. Максимальная глубина проникновения индентора в пленки не превышала 120 nm, что обеспечивает полное исключение вклада подложки, поскольку толщина пленок по данным РЭМ (см. рис. 1) больше 1 μm . Толщины слоев $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, найденные по данным РЭМ, равны примерно 5, 2.5 и 1.4 μm для образцов, выращенных на поверхностях с ориентациями (001), (011) и (111) соответственно. По микрофотографиям срезов видно, что пленка $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ на Si(001)/SiC однородна несмотря на шероховатость поверхности (см. рис. 1, *a*), в отличие от слоя $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ на Si(011)/SiC, который имеет трещины и ямы (см. рис. 1, *b*).

Шероховатость поверхности пленок $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ дополнительно исследовали методом атомно-силовой микроскопии (АСМ). Анализ данных АСМ однозначно указывает

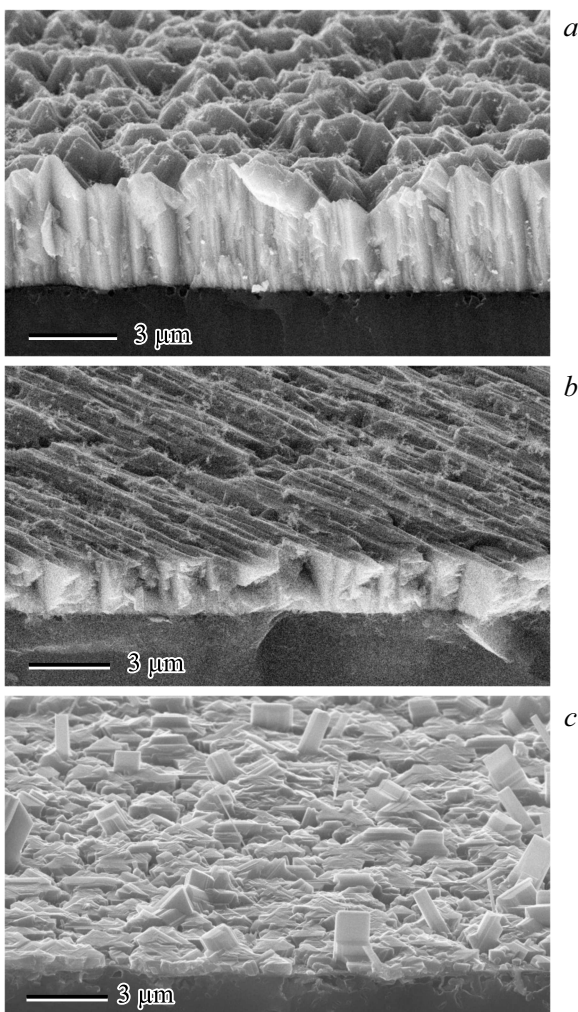


Рис. 1. Электронные микрофотографии срезов пленок $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, выращенных на буферном слое SiC на подложках Si с кристаллографическими плоскостями (001) (*a*), (011) (*b*) и (111) (*c*).

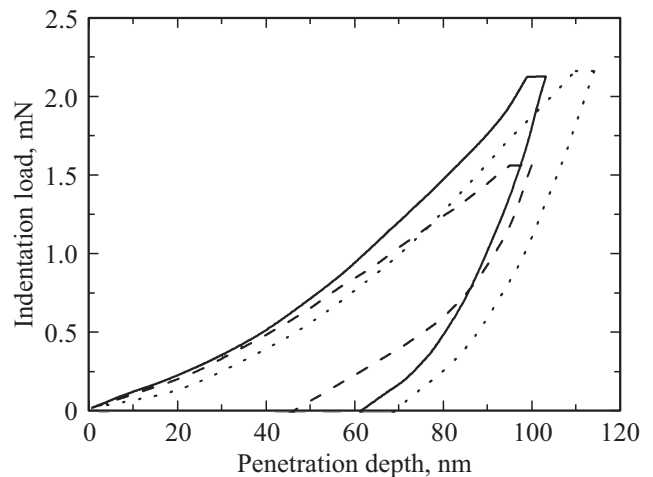


Рис. 2. Кривые упругопластической деформации и упругого восстановления, полученные при наноиндентировании пленок $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, выращенных на буферном слое SiC на подложках Si с кристаллографическими плоскостями (001) (сплошная линия), (011) (штриховая линия) и (111) (пунктирная линия).

на высокую шероховатость поверхности исследуемых образцов. В отношении поверхности пленки $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, выращенной на SiC/Si(001) анализ АСМ показывает, что пленка имеет крупнозернистую структуру. В этой структуре площадь зерен лежит в интервале от 17 до 25 μm^2 , а шероховатость равна 0.6 μm . Пленка $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, выращенная на Si(011)/SiC, имеет более мелкую структуру, площадь зерен редко превышает 10 μm^2 , наслаиваются они в виде чешуек (см. рис. 1, *b*). Шероховатость поверхности пленки $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ на SiC/Si(011) составила 0.3 μm . Структура поверхности пленки $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ на SiC/Si(111) имеет крупные кристаллические наросты (рис. 1, *c*). Площадь наростов в среднем равна 150 μm^2 , а высота достигает 6 μm и более. Шероховатость поверхности данной структуры равна 1.8 μm . Что же касается площадок без наростов, то шероховатость поверхности таких участков равна примерно 0.7 μm .

Упругопластические свойства пленок $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ на SiC/Si исследовали путем анализа кривых упругопластической деформации при нагружении индентора и упругого восстановления при его разгрузке. На рис. 2 представлены типичные зависимости силы, приложенной к индентору, от глубины его проникновения в образец для пленок $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, выращенных на структурах SiC на Si с кристаллографическими плоскостями (001), (011) и (111). По углу наклона кривой упругого восстановления вычислялись величины упругих жесткостей в контакте для исследуемых образцов. Хорошо видно, что угол наклона начального этапа разгрузки для пленки $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ на SiC на Si(001) больше, чем на кремнии с другими ориентациями. Это свидетельствует о том, что данная пленка более жесткая, чем выращенная на SiC на Si(011) и Si(111). В среднем величина упругой жесткости в контакте составила 0.10 mN/nm для пленки $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, выращенной на SiC/Si(001), 0.086 mN/nm для

пленки $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, выращенная на SiC/Si(011) и 0.058 для пленки $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, выращенной на SiC/Si(111). Помимо жесткости в контакте, величиной, характеризующей упругие свойства материала при индентировании, является так называемый параметр упругого восстановления (elastic recovery parameter ERP), который вычисляется по формуле $\text{ERP} = (h_{\text{max}} - h_f)/h_{\text{max}}$, где h_f — глубина остаточного отпечатка или глубина, на которую смещен индентор относительно недеформированной плоскости при полной разгрузке. В нашем случае ERP в среднем равен 0.18, 0.22 и 0.25 для пленок $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, выращенных на структурах SiC/Si(001), SiC/Si(011) и SiC/Si(111) соответственно. Этот результат подтверждает тот факт, что пленка $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ на SiC/Si(001) менее упруга, чем пленки $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, выращенные на структурах SiC/Si(011) и SiC/Si(111). Анализ кривых наноиндентирования по МОФ в случае пленки $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ на SiC/Si(001) дает $H = 11 \pm 1$ GPa, $E = 215 \pm 15$ GPa, в случае пленки $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ на SiC/Si(011) дает $H = 10 \pm 2$ GPa, $E = 185 \pm 25$ GPa и в случае пленки $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ на SiC/Si(111) дает $H = 9 \pm 2$ GPa, $E = 120 \pm 15$ GPa. Следует отметить, что для расчета модуля упругости исследуемых образцов был взят усредненный по методу Хилла [17] коэффициент Пуассона для поликристаллического $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, значение которого составляет 0.31. Использование усредненного коэффициента Пуассона обусловлено анизотропией кристалла $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$.

4. Квантово-химическое моделирование упругопластических свойств $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$

Для сопоставления полученных экспериментальных данных с теоретическими в настоящей работе упругие свойства кристалла $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ были промоделированы методами квантовой химии [18]. Прежде всего, необходимо отметить, что $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ обладает моноклинной $C2/m$ симметрией, что означает, что упругие свойства по осям x, y, z будут различными. Вид кристаллической структуры $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ в стандартной ориентации [18] в срезах по плоскостям (100), (010), (001) показан на рис. 3. В общем случае моноклинной симметрии тензор упругости c_{ij} кристалла со стандартной ориентацией будет иметь вид [18]

$$c_{ij} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & c_{15} & 0 \\ c_{12} & c_{22} & c_{23} & 0 & c_{25} & 0 \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} & 0 & c_{35} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & c_{46} \\ c_{15} & c_{25} & c_{35} & 0 & c_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{46} & 0 & c_{66} \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Из 36 элементов тензора имеются лишь 13 различных ненулевых элементов. Вычисление тензора упругости проводилось методом функционала плотности

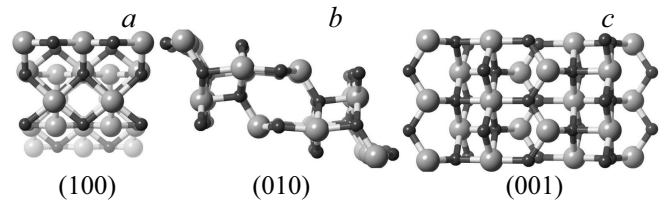


Рис. 3. Атомная структура кристалла $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ в направлениях, перпендикулярных плоскостям (100) (a), (010) (b), (001) (c). Большие светлые кружки — атомы галлия, маленькие темные кружки — атомы кислорода.

в базисе плоских волн с использованием приближения псевдопотенциалов. Для этого использовался код Quantum Espresso [19]. Обменно-корреляционные эффекты вычислялись в рамках градиентного функционала PBEsol [20]. Для расчетов использовались нормосохраняющие псевдопотенциалы, приводящие к погрешности порядка 0.5 meV/atom. Энергия обрезания плоских волн составляла 60 Ha. В обратном пространстве использовалась сетка по схеме Монхорста–Пака из $7 \times 7 \times 4$ точек, отвечающая расстоянию между точками 0.051/Å. Расчет дает следующее значение для тензора упругости

$$c_{ij} = \begin{pmatrix} 227 & 128 & 135 & 0 & -3.6 & 0 \\ 128 & 335 & 72.8 & 0 & 0 & 0 \\ 135 & 72.8 & 313 & 0 & 18 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 45.3 & 0 & 6.4 \\ -3.6 & 0 & 18 & 0 & 83 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6.4 & 0 & 99 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где все компоненты выражены в GPa, причем c_{25} случайно оказался равен 0. Компоненты данного тензора не сильно отличаются от результатов расчета в рамках приближения локальной плотности с использованием присоединенных плоских волн [21]. Вычисление матрицы, обратной к (2), дает коэффициенты тензора податливости, выраженные в GPa^{-1}

$$s_{ij} = \begin{pmatrix} 0.0072 & -0.0022 & -0.0027 & 0 & 0.0009 & 0 \\ -0.0022 & 0.0038 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -0.0027 & 0 & 0.0044 & 0 & -0.0011 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.0223 & 0 & -0.0014 \\ 0.0009 & 0 & -0.0011 & 0 & 0.0123 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0.0014 & 0 & 0.0102 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

Отсюда могут быть вычислены зависимости от направления модуля Юнга, коэффициента Пуассона, модуля сдвига и других упругих характеристик $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$. В частности, модули Юнга по направлениям [100], [010], [001], изображенным на рис. 3, равны соответственно $E_x = 138$ GPa, $E_y = 263$ GPa, $E_z = 228$ GPa, а коэффициенты Пуассона равны $\nu_{xy} = 0.30$, $\nu_{xz} = 0.37$, $\nu_{yx} = 0.57$, $\nu_{yz} = -0.02$, $\nu_{zx} = 0.61$, $\nu_{zy} = -0.01$. Рассчи-

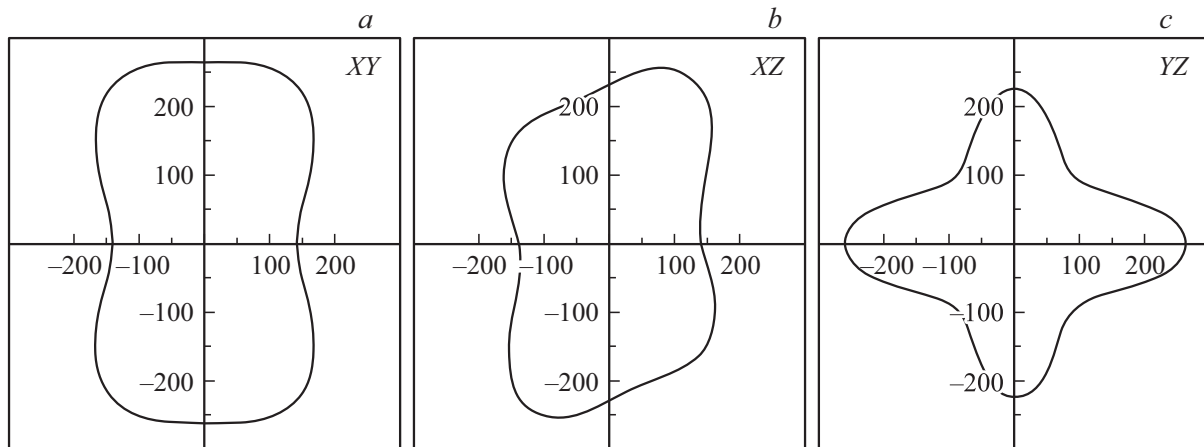


Рис. 4. Проекция поверхности модуля Юнга на плоскости xy (a), xz (b), yz (c), рассчитанные методами квантовой химии с помощью тензора податливости (3).

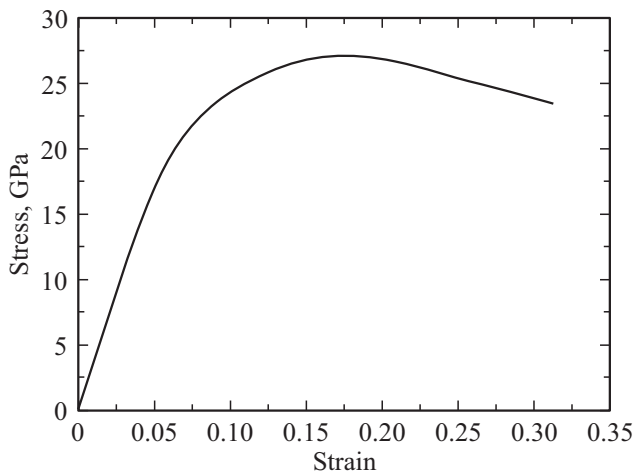


Рис. 5. Зависимость напряжение–деформация для кристалла $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ в направлении $[100]$, вычисленная методами квантовой химии. Точка максимума $\sigma = 27$ GPa соответствует пределу прочности в данном направлении.

танные проекции поверхности модуля Юнга на плоскости xy , xz и yz изображены на рис. 4. Усреднение по методу Хилла [18] дает следующие результаты для поликристалла $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$: объемный модуль $B = 171$ GPa, модуль сдвига $G = 76$ GPa, модуль Юнга $E = 198$ GPa, коэффициент Пуассона $\nu = 0.31$. Именно это значение коэффициента Пуассона использовалось при обработке данных наноиндентирования.

Твердость H напрямую методами квантовой химии не моделируется. Однако, ее можно определить косвенно, зная предел прочности σ , а предел прочности можно оценить, рассчитав методами квантовой химии зависимость напряжение–деформация. Моноклинная симметрия означает очень сложную зависимость как предела прочности, так и твердости от направления. Поэтому в настоящей работе моделировалась деформация лишь в

плоскости (100) (см. рис. 4, a), так как именно в направлении, перпендикулярном плоскости (100) , модуль Юнга наименьший по сравнению с направлениями, перпендикулярными плоскостям (010) и (001) . По заданной деформации методом функционала плотности вычислялся модуль напряжения в кристалле. Использовались те же самые приближения, что и при расчете тензора упругости, т.е. функционал PBESOL [20], энергия обрезания плоских волн 60 Ha, сетка по схеме Монхорста–Пака из $7 \times 7 \times 4$ точек. Полученная зависимость напряжение–деформация в направлении $[100]$ изображена на рис. 5. Предел прочности $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ в направлении $[100]$ σ_x оценивается как точка максимума этой кривой, т.е. $\sigma_x = 27$ GPa. Тогда по классической изотропной модели расширяющейся полости, предложенной Джонсоном [22], можно оценить твердость кристалла H

$$H = \frac{2}{3} \left[1 + \ln \left(\frac{E \cos \theta}{3\sigma} \right) \right], \quad (4)$$

где E — модуль Юнга, θ — половина угла индентора (в нашем случае $\theta = 65.03^\circ$). Учитывая, что в направлении $[100]$ $E_x = 138$ GPa, из формулы (4) получим $H \approx 10.7$ GPa. Оценить твердость в других направлениях по изотропной формуле (4) не представляется возможным, так как маленький модуль Юнга E_x будет искажать деформацию в направлениях, где модуль Юнга больше.

5. Обсуждение результатов и заключение

В настоящей работе методом наноиндентирования впервые были исследованы упругопластические свойства пленок $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ на подложках SiC/Si(001), SiC/Si(011) и SiC/Si(111). Показано, что пленка $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ на подложке Si(001)/SiC является наиболее жесткой, а на Si(111)/SiC — наименее жесткой. Моделирование упругих свойств $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ методами квантовой

химии показало, что они являются сильно анизотропными. В частности, рассчитаны проекции поверхности модуля Юнга на плоскости $xу$, xz , yz (рис. 4). Модуль Юнга в направлении $[100]$ равен 138 GPa и близок к минимальному модулю Юнга 129 GPa (который соответствует направлению $[-0.1, 0.7, 0.7]$ в стандартной ориентации). В пределах погрешности (как экспериментальной, так и теоретической) данное значение модуля Юнга соответствует модулю Юнга β -Ga₂O₃ $E = 120$ GPa, выращенному на SiC/Si(111). Кроме того, прямоугольная огранка кристаллов β -Ga₂O₃ в этом случае как раз соответствует плоскости (100) в стандартной ориентации (рис. 3, а). Поэтому можно сделать вывод о том, что на подложке SiC/Si(111) оксид галлия преимущественно растет в направлении $[100]$. Измеренный коэффициент твердости β -Ga₂O₃ в этом случае $H = 9$ GPa также в пределах погрешности совпадает с коэффициентом твердости в направлении $[100]$ $H = 10.7$ GPa, который оценивался методами квантовой химии с помощью предела прочности в этом направлении. На подложках SiC/Si(011) и SiC/Si(001) оксид галлия растет более жесткий, особенно в последнем случае, что говорит об изменении ориентации оксида галлия. Возможно, что в случае SiC/Si(001) ориентация оксида галлия близка к направлению $[100]$ с теоретическим модулем Юнга $E = 263$ GPa. Различие между этим значением и экспериментально измеренным $E = 215$ GPa может объясняться не только отличием ориентации оксида галлия от направления $[010]$, но и несовершенством методики Оливера–Фарра, вынужденной использовать усредненный коэффициент Пуассона. Как показало моделирование методами квантовой химии коэффициент Пуассона оксида галлия очень сильно зависит от направления. Более того, ν_{yz} и ν_{zy} принимают небольшие отрицательные значения, т.е. оксид галлия является ауксетиком. Это лишний раз подчеркивает перспективность данного материала.

В целом, данные моделирования методами квантовой химии неплохо совпадают с экспериментальными данными, полученными наноиндентированием, что свидетельствует о том, что упругопластические свойства пленок β -Ga₂O₃, выращенных на подложках Si с буферным слоем SiC, примерно соответствуют свойствам объемных кристаллов.

Список литературы

- [1] M. Higashiwaki, K. Sasaki, A. Kuramata, T. Masui, S. Yamakoshi. Appl. Phys. Lett. **100**, 013504 (2012).
- [2] K. Sasaki, M. Higashiwaki, A. Kuramata, T. Masui, S. Yamakoshi. IEEE Electron Dev. Lett. **34**, 493 (2013).
- [3] Y. Qu, Zh. Wu, M. Ai, D. Guo, Y. An, H. Yang, L. Li, W. Tang. J. Alloys Comp. **680**, 247 (2016).
- [4] S. Nakagomi, T. Sai, Y. Kokubun. Sensors Actuators B **187**, 413 (2013).
- [5] K. Sasaki, M. Higashiwaki, A. Kuramata, T. Masui, S. Yamakoshi. J. Cryst. Growth **378**, 591 (2013).
- [6] D. Gogova, G. Wagner, M. Baldini, M. Schmidbauer, K. Irmscher, R. Schewski, Z. Galazka, M. Albrecht, R. Fornari. J. Cryst. Growth **401**, 665 (2014).
- [7] Y. Oshima, E.G. Villora, Y. Matsushita, S. Yamamoto, K. Shimamura. J. Appl. Phys. **118**, 085301 (2015).
- [8] V.I. Nikolaev, A.I. Pechnikov, S.I. Stepanov, I.P. Nikitina, A.N. Smirnov, A.V. Chikiryaka, S.S. Sharofidinov, V.E. Bougrov, A.E. Romanov. Mater. Sci. Semicond. Proc. **47**, 63 (2016).
- [9] С.А. Кукушкин, В.И. Николаев, А.В. Осипов, Е.В. Осипова, А.И. Печников, Н.А. Феоктистов. ФТТ **58**, 1812 (2016).
- [10] S.A. Kukushkin, A.V. Osipov. J. Appl. Phys. **113**, 4909 (2013).
- [11] T.S. Perova, J. Wasyluk, S.A. Kukushkin, A.V. Osipov, N.A. Feoktistov, S.A. Grudinkin. Nanoscale Res. Lett. **5**, 1507 (2010).
- [12] Л.М. Сорокин, Н.В. Веселов, М.П. Щеглов, А.Е. Калмыков, А.А. Ситникова, Н.А. Феоктистов, А.В. Осипов, С.А. Кукушкин. Письма в ЖТФ, **34**, 46 (2008).
- [13] A.C. Fischer-Cripps. Nanoindentation. Heidelberg, Springer (2011). 277 p.
- [14] А.С. Гращенко, С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. Письма в ЖТФ, **40**, 24, 56 (2014).
- [15] A.S. Grashchenko, S.A. Kukushkin, A.V. Osipov, A.V. Redkov. J. Phys. Chem. Solid. **102**, 151 (2017).
- [16] W.C. Oliver, G.M. Pharr. J. Mater. Res. **7**, 1564 (1992).
- [17] J.F. Nye. Physical Properties of Crystals. Clarendon, Oxford (1985). 339 p.
- [18] J.G. Lee. Computational Materials Science. An Introduction. CRS Press, Taylor & Francis Group, Boca Raton (2017). 351 p.
- [19] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G.L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, A.D. Corso, S. Gironcoli, S. Fabris, G. Fratesi, Gebauer, F. Mauri, R. Mazzerello, S. Paolini, A. Pasquarello, L. Paulatto, C. Sbraccia, A. Smogunov, P. Umari, R.M. Wentzcovitch. J. Phys.: Condens. Matter. **21**, 395502 (2009).
- [20] J.P. Perdew, A. Ruzsinszky, G.I. Csonka, O.A. Vydrov, G.E. Scuseria, L.A. Constantin, X. Zhou, K. Burke. Phys. Rev. Lett. **100**, 136406 (2008).
- [21] Y. Oshima, E. Ahmadi, S.C. Badescu, F. Wu, J.S. Speck. Appl. Phys. Express **9**, 061102 (2016).
- [22] K.L. Johnson. Contact Mechanics. University Press, Cambridge (2003). 452 p.