

Анизотропия твердофазной эпитаксии карбида кремния на кремнии

© С.А. Кукушкин[†], А.В. Осипов

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,
199178 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 22 апреля 2013 г. Принята к печати 30 апреля 2013 г.)

Разработан новый метод твердофазного синтеза эпитаксиальных слоев, когда подложка сама участвует в химической реакции, а продукт реакции растет не на поверхности подложки, как в традиционных методах эпитаксии, а внутри нее. Такой метод открывает новые возможности для релаксации упругой энергии за счет механизма, действующего только в анизотропных средах, а именно притяжения точечных дефектов, образующихся в процессе химической реакции. Притягивающиеся точечные центры дилатации образуют относительно устойчивые образования — дилатационные диполи, которые существенно уменьшают общую упругую энергию. Показано, что в кристаллах с кубической симметрией наиболее выгодным расположением диполей является направление $\langle 111 \rangle$. Теория апробирована на примере роста пленок карбида кремния SiC на подложках кремния Si(111) за счет химической реакции с монооксидом углерода CO. Выращены высококачественные монокристаллические пленки SiC-4H толщиной до 100 нм на Si(111). Эллипсометрический анализ показал, что оптические константы пленок SiC-4H являются существенно анизотропными. Это вызвано не только гексагональностью решетки, но и небольшим количеством атомов углерода, $\sim (2-6)\%$, оставшихся в пленке из-за дилатационных диполей. Показано, что оптические константы углеродной примеси соответствуют сильно анизотропному пиролитическому углероду НОРГ.

1. Введение

Получение высококачественных пленок широкозонных полупроводников, таких как карбид кремния (SiC), нитрид алюминия (AlN), нитрид галлия (GaN), на подложках кремния (Si) является одной из важнейших задач микро- и оптоэлектроники [1]. Это даст возможность интегрировать целый ряд новых полупроводниковых материалов в кремниевую электронику. Главным препятствием к выращиванию высококачественных низкодефектных пленок SiC, AlN, GaN на Si являются упругие напряжения, вызванные несоответствием параметров решеток этих полупроводников и параметра решетки Si ($\sim 20\%$) [2,3]. В настоящее время разрабатываются различные дорогостоящие методы, использующие целый ряд масок и буферных слоев, снижающих упругие напряжения, однако полученные пленки широкозонных полупроводников все равно содержат достаточно большое количество дислокаций несоответствия, значительно ухудшающих электрофизические параметры полупроводниковых материалов.

В настоящей работе предлагается принципиально новый подход к гетероэпитаксии тонких пленок, в котором возникающие упругие напряжения релаксируют за счет очень сильного притяжения точечных дефектов различного типа, а именно атомной вакансии и чужеродного атома, находящегося в межузельной позиции. Оба этих точечных дефекта являются центрами дилатации, и за счет притяжения друг к другу они образуют относительно устойчивое состояние — дилатационный диполь, названный так по аналогии с электрическим диполем. Показано, что образование ансамбля дилатационных диполей обеспечивает очень эффективную релаксацию упругих напряжений, гораздо более эффективную, чем

при использовании масок или буферных слоев. В частности, при росте SiC на Si с параметром несоответствия решеток 20% упругие напряжения релаксируют полностью и дислокации несоответствия не образуются. Это позволяет выращивать толстые слои SiC, AlN, GaN (они имеют примерно одинаковые параметры решетки) и гетероструктуры на их основе на подложках Si.

В настоящей работе выдвигается идея выращивать пленки SiC непосредственно в объеме подложки Si, а не на ее поверхности, как при традиционном росте [4]. Материал подложки Si непосредственно участвует в химической реакции с образованием SiC. При этом происходит объемное упорядочение кристаллической структуры SiC всей исходной матрицей Si. Если обрабатывать подложку Si газом, содержащим углерод C, например C₂H₄, CH₄, CCl₄, CO, CO₂, то во всех случаях при определенных температуре и давлении газа вырастет пленка SiC. Однако наша цель — получить высококачественную пленку SiC, обеспечив эффективный механизм релаксации упругих напряжений за счет взаимодействия точечных дефектов, возникающих в процессе химической реакции. Поэтому из всего разнообразия реакций мы выбираем реакцию с участием монооксида углерода CO:



Данная реакция обеспечивает образование в матрице Si точечных дефектов двух типов, а именно кремниевой вакансии, так как из системы выводится газообразный монооксид кремния SiO, и атома углерода C, который после потери кислорода находится в межузельной позиции в кристалле Si. Эти дефекты образуются в Si парами и вызывают дилатационные деформации, т.е. являются центрами дилатации в кубическом кристалле Si. Если среда является бесконечной и изотропной,

[†] E-mail: Kukushkin_s@yahoo.com

то сферически-симметричные дилатационные центры в ней не взаимодействуют [5]. В реальных кристаллах с кубической или гексагональной структурой взаимодействие сферически-симметричных дилатационных центров определяется направлением прямой, соединяющей дилатационные центры. В зависимости от направления и от знака дилатационных деформаций они могут как притягиваться, так и отталкиваться. Этот результат, а также грубые оценки энергии взаимодействия были получены еще в 1955 г. в работе Эшелби для кристаллов с кубической симметрией [6]. Уже тогда было ясно, что энергия взаимодействия центров дилатации в анизотропных кристаллах может быть очень большой, но никто не использовал ее для релаксации упругих напряжений растущих гетероэпитаксиальных пленок. В данном подходе это делается впервые.

2. Теоретическая модель твердофазной эпитаксии SiC на Si и образования дилатационных диполей

Оценим вначале дилатационную составляющую упругих напряжений в пленке SiC, растущей непосредственно из матрицы Si за счет реакции (1). Вынем из матрицы Si некоторое количество атомов и превратим ее в SiC, добавив на место каждого вынутого атома по атому C. Плотность атомов в Si есть $N^{\text{Si}} \approx 5.0 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$, а плотность атомов Si в SiC равна $N^{\text{SiC}} \approx 4.83 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$. Таким образом, объем, приходящийся на молекулу SiC в кристалле SiC, возрастает примерно на $\delta = 3.4\%$. Если между SiC и Si нет когерентности, то упругие напряжения будут обусловлены только дилатацией. Модуль сдвига Si $\mu^{\text{Si}} = 52 \text{ ГПа}$, а модуль сжатия SiC $K^{\text{SiC}} = 250 \text{ ГПа}$. Отсюда, следуя стандартной методике, можно оценить величину возникающих упругих напряжений. В частности, радиальная компонента сдвиговых напряжений равна

$$\sigma_{rr} \approx -\frac{\mu^{\text{Si}} K^{\text{SiC}}}{K^{\text{SiC}} + \mu^{\text{Si}}} \delta \approx -1.5 \text{ ГПа}, \quad (2)$$

или $\sim 0.18 \text{ эВ/атом}$. При когерентном сопряжении пленки и подложки эти напряжения будут в несколько раз больше и иметь другой знак, а именно

$$\sigma_{rr} \approx \frac{\mu^{\text{Si}}}{1 - \nu^{\text{Si}}} (\delta_1^2 + \delta_2^2 + 2\nu^{\text{Si}} \delta_1 \delta_2) \approx 7 \text{ ГПа}, \quad (3)$$

где $\nu^{\text{Si}} = 0.26$ — коэффициент Пуассона, δ_1 и δ_2 — параметры несоответствия решеток пленки и подложки по двум направлениям в плоскости раздела пленка-подложка.

Рассмотрим теперь другой механизм роста, когда внутрь матрицы Si внедряется атом C, а соседний с ним атом Si удаляется посредством газообразного продукта реакции SiO (1), т.е. образуется вакансия.

Опишем взаимодействие двух точечных дефектов, а именно атома C в междоузлии и кремниевой вакансии в кристалле. Согласно классической теории упругости, энергию взаимодействия двух точечных дефектов I и II в твердом теле можно представить как взаимодействие одного дефекта с полем упругих напряжений, созданным другим дефектом. Сами дефекты моделируются центрами дилатации, имеющими мощность Ω^{I} и Ω^{II} . В этом случае потенциальная энергия парного взаимодействия центров дилатации I и II имеет вид [5]

$$E_{\text{int}}(r) = -K\Omega_{ij}^{\text{I}}\varepsilon_{ij}^{\text{II}}(r), \quad (4)$$

где $K = (c_{11} + 2c_{12})/3$ — модуль всестороннего сжатия материала кристалла ($K^{\text{Si}} = 98 \text{ ГПа}$), c_{ij} — модули упругости кристалла; Ω_{ij}^{I} — тензор дилатации первого дефекта, находящегося в начале координат; $\varepsilon_{ij}^{\text{II}}(r)$ — тензор деформации, вызванной воздействием второго дефекта, находящегося в точке r . Здесь и далее по повторяющимся индексам идет суммирование. При этом вкладом слагаемых в энергию взаимодействия, квадратичным по деформациям, пренебрегается, поскольку в анизотропных средах они имеют второй порядок малости по сравнению с (4). Будем считать, что точечные дефекты сферически-симметричны и несжимаемы, т.е. $\Omega_{ij}^{\text{I,II}} = \Omega^{\text{I,II}}\delta_{ij}$, где δ_{ij} — символ Кронекера. Тогда для вычисления E_{int} достаточно найти главный инвариант тензора деформации $\varepsilon_{ij}^{\text{II}} = \partial u_i / \partial x_j$, где u_i — вектор смещения,

$$u_i = \frac{K\Omega^{\text{II}}\partial G_{ij}(x, x')}{(\partial x'_j|_{x'=0})}. \quad (5)$$

Здесь G_{ij} — тензорная функция Грина точечного дефекта в кристалле. Окончательно получим для энергии взаимодействия сферически-симметричных несжимаемых дефектов [7–9]

$$E_{\text{int}} = -K^2\Omega^{\text{I}}\Omega^{\text{II}} \frac{\partial^2 G_{ij}}{\partial x_i \partial x'_j|_{x'=0}}. \quad (6)$$

Кремний удовлетворяет условию слабой анизотропии

$$\eta = \left| \frac{c_{11} - c_{12}}{2c_{44}} \right| < 1,$$

поэтому для $G(x, x')$ можно воспользоваться приближенной функцией Грина для случая бесконечных слабо анизотропных кристаллов с кубической симметрией, выведенной Лифшицем и Розенцвейгом [10]. Подставляя ее в (6), после преобразований получим

$$E_{\text{int}} = E_0 \left(\cos^4 \varphi_x + \cos^4 \varphi_y + \cos^4 \varphi_z - \frac{3}{5} \right), \quad (7)$$

$$E_0 = \frac{15K(1-\eta)}{4\pi} \frac{3c_{11} - 4c_{44}}{c_{12} + 2c_{44}} \frac{\Omega^{\text{I}}\Omega^{\text{II}}}{r^3}, \quad (8)$$

где $\cos \varphi_i = x_i/r$ — косинусы между осями x, y, z и направлением прямой, соединяющей центры взаи-

модействующих дефектов. Величина $\cos^4 \varphi_x + \cos^4 \varphi_y + \cos^4 \varphi_z - 3/5$ имеет минимум в направлении $\langle 111 \rangle$, равный -0.27 , отвечающий притяжению одноименных дефектов (когда и тот и другой, например, сжимают решетку, как вакансии и маленький межузельный атом), максимум в направлении $\langle 100 \rangle$, равный 0.4 , отвечающий отталкиванию одноименных дефектов, и седловую точку -0.1 в направлении $\langle 110 \rangle$. Поэтому наиболее энергетически выгодным расположением одноименных точечных дефектов является направление $\langle 111 \rangle$, когда атом С располагается в межузлии под плоскостью (111) вдоль плоскости (011) , а вакансия, которая образовалась одновременно с этим атомом в результате реакции (1), расположена по отношению к атому С вдоль направления $\langle 111 \rangle$. В этом случае взаимодействие точечных дефектов уменьшает общую упругую энергию, что делает данные пары дефектов относительно устойчивыми. Мы называем их дилатационными диполями по аналогии с электрическими диполями.

Мощности центров дилатации вакансии Ω_v и атома углерода Ω_a могут быть оценены с помощью классических результатов Эшелби и данных о радиусе атома углерода и об эффективном радиусе кремниевой вакансии [6]: $\Omega_a = -0.29V^{Si}$, $\Omega_v = -0.68V^{Si}$, где $V^{Si} = 2.0 \cdot 10^{-29} \text{ м}^{-3}$ — объем, приходящийся на один атом в Si. Это дает следующую оценку для энергии притяжения дефектов в направлении $\langle 111 \rangle$: $E_{int} = -1.0 \text{ эВ}$. Энергии упругого искажения решетки вакансией E_v и атомом углерода E_a можно оценить в предположении, что среда изотропна, а дефекты являются несжимаемыми [6]. В этом случае $E_v = 0.73 \text{ эВ}$, $E_a = 0.14 \text{ эВ}$. Итак, если атом углерода просто участвует в дилатации, то упругая энергия, приходящаяся на одну молекулу SiC, как показано выше, равна $W_{dil} = \sigma_{rr} = 0.18 \text{ эВ}$, а если он является составной частью дилатационного диполя, то упругая энергия, приходящаяся на одну молекулу SiC, равна $W_{dip} = E_v + E_a + E_{int} = -0.13 \text{ эВ}$. На 8 молекул SiC может приходиться не более 5 дилатационных диполей, поэтому максимальное значение релаксации упругой энергии за счет образования дилатационных диполей равно $\Delta W = (5/8)(W_{dil} - W_{dip}) \approx 0.19 \text{ эВ}$ на одну молекулу SiC. Таким образом, дилатационная упругая энергия может полностью релаксировать за счет одних только дилатационных диполей, так как $W_{dil} - \Delta W \leq 0$. Иными словами, данный механизм релаксации очень эффективен.

Таким образом, на первом этапе протекания химической реакции образуется метастабильное соединение, отличающееся по составу и структуре и от Si, и от SiC (рис. 1). Оно состоит из слоев кремния и углерода, который в данном соединении двухвалентен, разделенных слоем вакансий. Диполи стабилизируют данную структуру, заменяя оборванные химические связи упругим взаимодействием (рис. 1). Такие промежуточные состояния в химии называются переходными комплексами [11]. Обычно их образование связано с тем, что на предварительной стадии реакции для ее

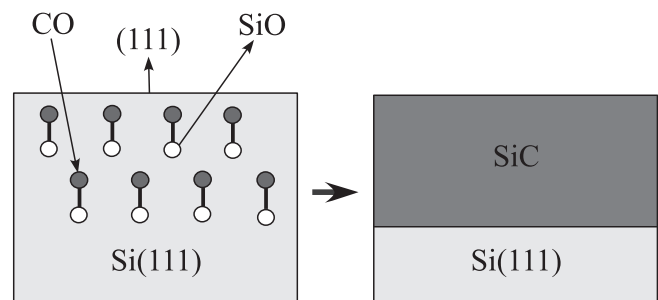


Рис. 1. Схематическое изображение механизма твердофазной эпитаксии SiC внутри подложки Si(111) за счет химической реакции материала подложки и газа CO. Точечные дилатационные дефекты образуются за счет химической реакции в Si парах, а именно атом С в межузлии (темный кружок) и кремниевая вакансия (светлый кружок). Сильное притяжение между ними приводит к образованию дилатационных диполей, обеспечивающих релаксацию упругих напряжений и ориентацию слоя SiC. Сам слой SiC образуется из Si посредством низкобарьерного фазового перехода первого рода через промежуточное вещество, состоящее из Si, насыщенное дилатационными диполями.

успешного протекания необходимо ослабить химические связи в исходном реагенте, удлинив их. Такое удлинение позволяет с наименьшими затратами энергии перейти реагентам в конечное состояние продуктов реакции. Такой переход часто является фазовым переходом первого рода, высота барьера которого близка к тепловой энергии $k_B T$. В данном случае упругие диполи, располагающиеся вдоль направления $\langle 111 \rangle$, приводят к анизотропии химической реакции, удлиняют химические связи в кремнии и способствуют образованию карбида кремния с наименьшими затратами энергии (рис. 1). Разрушение диполей за счет тепловых флуктуаций приводит к образованию бездислокационного SiC, а подвижные кремниевые вакансии, высвобождающиеся при этом, либо уходят на поверхность, либо собираются вместе под пленкой SiC, образуя поры в Si [7]. Неподвижные атомы углерода, возникающие при разрушении диполей, в подавляющем большинстве превращаются в SiC, но те из них, которые не превратились в SiC, остаются в SiC как примесь.

Фазовый переход из промежуточного комплекса в конечное состояние часто сопровождается другим фазовым переходом первого рода в исходной матрице. Этот второй переход невозможен без образования конечной фазы, т.е. без первого перехода, поэтому можно говорить о ведущем и ведомом фазовых переходах. Например, в твердых телах очень часто ведущий переход приводит к возникновению упругих напряжений между исходной и новой фазами, а упругие напряжения в свою очередь приводят к другому, ведомому фазовому переходу в исходной фазе. В данном случае фазовый переход из Si в SiC приводит к образованию усадочных пор в Si на границе раздела между SiC и Si, что также является фазовым переходом. Этот процесс будет исследован в отдельной работе.

3. Экспериментальные результаты и обсуждение

Для проверки основных результатов модели, представленной выше, был проведен целый ряд экспериментов по выращиванию пленок SiC из подложки Si за счет реакции (1). Подложки диаметром 33 мм монокристаллического кремния, ориентации как (111), так и (100), выдерживали в вакуумной печи при температуре $T = 1200\text{--}1300^\circ\text{C}$ в атмосфере CO при давлении $p_{\text{CO}} = 10\text{--}70$ Па в течение 5–60 мин. За это время в подложке Si выростала пленка SiC толщиной 20–200 нм [7]. На поверхности (100) релаксации упругой энергии не происходит. Пленка в этом случае является текстурированной и содержит большое количество дефектов и дислокаций. Вместе с тем на поверхности (111), как было предсказано теоретически, образуется ансамбль дилатационных диполей, который, с одной стороны, приводит к существенной релаксации упругих напряжений, а с другой — к упорядочению новой фазы по исходной структуре кремния. В результате вырастает пленка SiC высокого качества, не содержащая дислокаций несоответствия решеток [8]. Измерение упругих напряжений в пленках SiC/Si (111) с помощью измерителя упругих напряжений в тонких пленках FLX-2320-S дает среднее значение $\sigma \approx 0.5$ ГПа, т.е. на практике примерно 2/3 упругих дилатационных напряжений релаксируют за счет диполей. Важно подчеркнуть, что пленки SiC сжаты, а если бы они росли по классическому механизму, то они были бы растянуты, так как постоянные решетки SiC и Si равны соответственно $a^{\text{SiC}} = 4.357 \text{ \AA}$, $b^{\text{Si}} = 5.43 \text{ \AA}$.

Исследования эллипсометрических спектров образцов SiC/Si (111) показали, что оптические константы выращенных слоев являются анизотропными, т.е. оптические

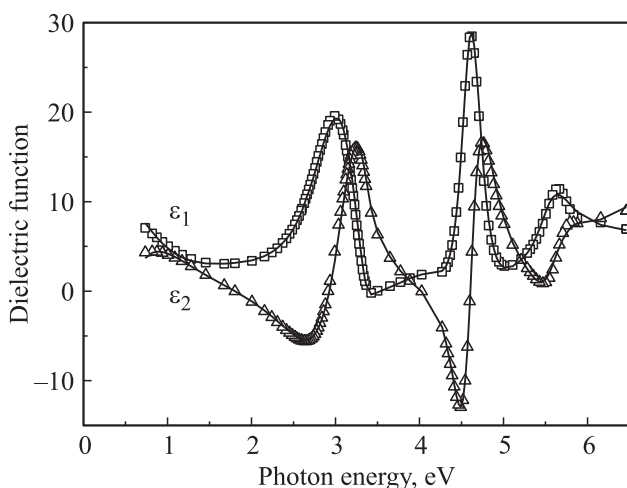


Рис. 2. Диэлектрическая проницаемость образца SiC/Si (111) в зависимости от энергии фотонов, измеренная эллипсометром J.P. Woollam. ϵ_1 — вещественная часть, ϵ_2 — мнимая часть. Точки — эксперимент, сплошная линия — теоретические спектры, полученные на основе анизотропной двухслойной модели.

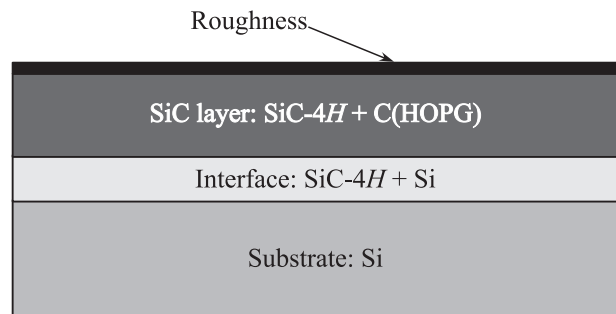


Рис. 3. Анизотропная двухслойная модель, описывающая эллипсометрические спектры образцов SiC/Si (111). Нижний слой — подложка Si, первый слой — буферный слой, состоящий из смеси 85% SiC-4H и 15% Si, толщиной 9 нм, второй — основной слой SiC, состоящий из смеси 94% SiC-4H и 6% графита HOPG, сверху — шероховатость 5 нм. Оптические константы SiC-4H и графита HOPG анизотропны.

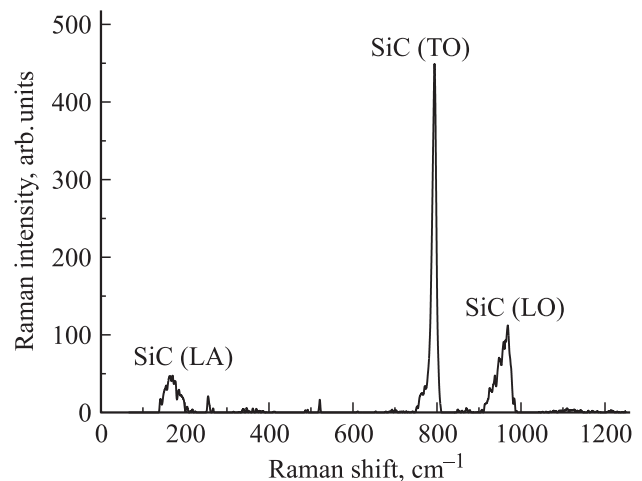


Рис. 4. Рамановский спектр слоя SiC, полученный из спектра SiC/Si (111) путем вычитания спектра подложки Si (111). Отмечены линии продольных оптических (LO), поперечных оптических (TO) и продольных акустических (LA) колебаний в SiC.

константы в плоскости образца не совпадают с оптическими константами в плоскости, перпендикулярной образцу. Такой эффект характерен для гексагональных политипов SiC, однако в данном случае анизотропия сильнее. Анализ различия оптических констант выращенных слоев и оптических констант SiC показал наличие примеси атомов углерода (от 2 до 6%), причем оптические константы дополнительного компонента полностью соответствуют пиролитическому графиту HOPG, обладающему очень сильной анизотропией. На рис. 2 приведена типичная зависимость диэлектрической проницаемости образца SiC/Si (111) от энергии фотонов, измеренная с помощью эллипсометра J.A. Woollam. Она очень хорошо описывается двухслойной эллипсометрической моделью (рис. 3), состоящей из подложки Si, переходного слоя, состоящего из 85% SiC-4H и

15% Si толщиной 9 нм, и слоя карбида кремния гексагонального политипа SiC-4H толщиной 71 нм, содержащего дополнительные атомы углерода в междоузлиях в виде фазы графита HOPG и имеющего шероховатость 5 нм. Предположительно, это и есть остатки от дилатационных диполей, которые располагались в слое примерно такой же толщины. В результате образцы SiC/Si (111) обладают сильной анизотропией оптических констант.

На рис. 4 приведен спектр рамановского рассеяния слоя SiC образца SiC/Si(111), полученный в конфокальном рамановском микроскопе WITec alpha300 R после процедуры вычитания сигнала подложки Si. Такая процедура необходима из-за того, что местоположение линии LO SiC и линии второго порядка Si практически совпадают и их необходимо разделить. Хорошо видна линия TA, характерная лишь для анизотропных гексагональных политипов SiC. Достоверно установить политип в данном случае невозможно из-за малой толщины SiC и соответственно малой интенсивности линий.

4. Заключение

Таким образом, в предлагаемом новом механизме роста SiC в объеме подложки Si вначале за счет химической реакции образуются точечные дефекты, а именно атомы C в междоузельных позициях и кремниевые вакансии. Подчеркнем, что молекула CO диффундирует в Si активно, но после потери атома кислорода оставшийся атом C практически неподвижен. Эти точечные дефекты сильно притягиваются друг к другу, образуя относительно устойчивые образования — дилатационные диполи. При этом формируются дальнедействующие поля упругих напряжений, создаваемые дилатационными диполями. Эти поля взаимодействуют с образующимися молекулами SiC и обеспечивают эффективную релаксацию упругих напряжений, создаваемых молекулами SiC. В идеальном случае все упругие напряжения ~ 1.5 ГПа могут релаксировать за счет одних только диполей. При традиционном эпитаксиальном росте пленки упругие напряжения примерно в 4 раза больше и могут релаксировать только за счет образования дислокаций несоответствия решеток и трещин. После распада диполей и образования SiC некоторая часть атомов C остается в SiC ($\sim 5\%$), что существенно влияет на свойства и характеристики SiC, например, на оптические константы, электрическую проводимость и даже политип.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 11-02-00496-а, 13-02-12040-офи-м, 12-02-00935-а), „Фонда поддержки науки и образования“ (Санкт-Петербург), программы президиума РАН № 27 „Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов“ и программы президиума РАН „Поддержка инноваций и разработок“.

Список литературы

- [1] S.J. Pearton. *Wide Bandgap Semiconductors: Growth, Processing and Applications* (William Andrew Publ./Noges, N. Y., 2000).
- [2] Jianwei Wan. *Heteroepitaxy of Wide Band Gap Semiconductors on Silicon Substrates* (VDM Verlag, 2009).
- [3] L. Liu, J.H. Edgar. *Mater. Sci. Engin.*, **R37**, 61 (2002).
- [4] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. УФН, **168**, 1083 (1998).
- [5] R. Siems. *Phys. Status Solidi*, **30**, 645 (1968).
- [6] J.D. Eshelby. *Acta Met.*, **3**, 487 (1955).
- [7] S.A. Kukushkin, A.V. Osipov. *J. Appl. Phys.*, **113**, 024909 (2013).
- [8] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. ДАН, **444**, 246 (2012).
- [9] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. Изв. РАН. МТТ, № 2, 122 (2013).
- [10] И.М. Лифшиц, Л.Н. Розенцвейг. ЖЭТФ, **17**, 783 (1947).
- [11] J.W. Christian. *The Theory of Transformations in Metals and Alloys* (Pergamon, Amsterdam, 2002).

Редактор Л.В. Шаронова

Anisotropy of solid-phase epitaxy of silicon carbide on silicon

S.A. Kukushkin, A.V. Osipov

Institute of Problems of Machine Science,
Russian Academy of Sciences,
199178 St. Petersburg, Russia

Abstract The new method of solid-phase synthesis of epitaxial layers when the substrate itself participates in the chemical reaction is developed. The product of reaction grows not on the substrate surface as in conventional methods of epitaxy but in the bulk of it. Such method gives new opportunities for relaxation of elastic stress at the expense of the mechanism operating only in anisotropic media, namely, attraction of the point defects which are forming in the course of chemical reaction. Being attracted the point dilatation centers form rather steady objects, namely, the dilatation dipoles which significantly reduce the whole elastic energy. It is shown that in crystals with cubic symmetry the most favorable arrangement of dipoles is the $\langle 111 \rangle$ direction. This theory is approved by the example of growth of silicon carbide SiC films on Si(111) substrates at the expense of chemical reaction with carbon monoxide CO. High-quality single-crystal SiC-4H films up to 100 nm thick on Si(111) have been grown. The ellipsometric analysis showed that the optical constants of the SiC-4H film are significantly anisotropic. It is caused not only by the hexagonal lattice, but also a small amount of atoms of carbon, $\sim (2-6)\%$, remained in the film due to dilatation dipoles. It is shown that optical constants of carbon impurity correspond to strongly anisotropic pyrolytic graphite HOPG.