Наносборка пленок SiC на Si - новый метод выращивания бездефектных эпитаксиальных структур. От теории до пратики. (Фазовые переходы в многокомпонентных твердых телах с химическими реакциями).

С.А. Кукушкин и А.В. Осипов

ИПМаш РАН, Санкт-Петербург

Теоретически разработан и экспериментально реализован новый метод выращивания низкодефектных, свободных от упругих напряжений пленок карбида кремния на кремниевых подложках. В этом методе релаксация неизбежных упругих напряжений обеспечивается за счет принципиально нового механизма, а именно, дилатационных диполей — устойчивых комплексов, состоящих из притягивающихся центров дилатации — атома углерода в межузельной позиции и кремниевой вакансии. На основе тензорной функции Грина для упруго-анизотропных сред получена зависимость энергии взаимодействия между точечными дефектами от их взаимного кристаллографического расположения в кремнии. Показано, что для кубического кристалла наиболее выгодным является расположение дилатационного диполя перпендикулярно плоскости (111). В этом случае практически вся дилатационная упругая энергия пленки может релаксировать за счет одних только диполей, что должно привести к высокому качеству пленок карбида кремния.

На примере химического взаимодействия газа CO с монокристаллической матрицей Si вскрыт механизм протекания гетерогенных химических реакций между газовой фазой и твердым телом. Теоретически описан новый вид фазовых переходов при которых одна из фаз стимулирует появление другой фазы. Вычислена работа образования и все основные термодинамические и кинетические характеристики двухфазных фазовых переходов.

Построена теория зарождения пленок SiC на вицинальных поверхностях кремния. Найдены условия, при которых реализуется бездефектный рост пленок SiC на Si.

Введено новое понятие - молекулярная затравка. Молекулярная затравка - молекула новой фазы, жестко закрепленная кристаллическом остове старой фазы, выполняющая роль центра кристаллизации новой фазы.

Впервые, на практике, осуществлена сборка пленок нанокарбида кремния на кремниевой подложке посредством синтеза дилатационных диполей, выполняющих роль молекулярных затравок. Выращены высокосовершенные слои карбида кремния на кремниевой подложке.

На основе таких пленок впервые создана широкозонная светодиодная структура на кремнии с подслоем эпитаксиального карбида кермния.