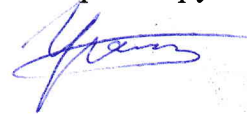


На правах рукописи



Гращенко Александр Сергеевич

Механические свойства пленок нано-SiC, синтезированных методом замещения атомов на Si и гетероструктур, выращенных на их основе

Специальность 1.1.8 (ранее 01.02.04) – механика деформируемого твердого тела

АВТОРЕФЕРАТ

диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург – 2022 г.

Работа выполнена в ФГБУН Институт проблем машиноведения Российской академии наук (ИПМаш РАН) в лаборатории структурных и фазовых превращений в конденсированных средах.

Научный руководитель: **Кукушкин Сергей Арсеньевич**
доктор физико-математических наук, профессор
ФГБУН Институт проблем машиноведения
Российской академии наук (ИПМаш РАН).

Официальные оппоненты: **Лисовенко Дмитрий Сергеевич**
доктор физико-математических наук,
заведующий лаборатории механики
технологических процессов ФГБУН Институт
проблем механики им. А.Ю. Ишлинского
Российской академии наук (ИПМех РАН);
Семенов Артем Семенович
кандидат физико-математических наук, доцент
ВШ "Механика и процессы управления" Физико-
механического института, ФГАОУ ВО "Санкт-
Петербургский политехнический университет
Петра Великого".

Ведущая организация: ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский
государственный университет» (СПбГУ),
г. Санкт-Петербург.

Защита состоится «23» июня 2022 года в 14 часов 00 минут на заседании диссертационного совета Д002.075.01 на базе ФГБУН «Института проблем машиноведения Российской академии наук» по адресу: 199178, г. Санкт-Петербург, Васильевский остров, Большой проспект, д. 61, ауд. 14.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГБУН «Института проблем машиноведения Российской академии наук», <https://ipme.ru/dissert/objavlenie-o-zaschite-dissertacii-a-s-graschenko.html>

Автореферат разослан «__» _____ 2022 года.

Врио ученого секретаря
диссертационного совета

Седакова Елена Борисовна

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования

В основе современных электронных приборов, компьютеров, приборов средств связи, датчиков, передающей и воспроизводящей аппаратуры лежат микросхемы, изготовленные на основе полупроводниковых материалов. Одним из основных полупроводниковых материалов, на базе которого в настоящее время изготовлено большинство разнообразных приборов и, в частности, таких как: солнечные батареи, мобильные телефоны, спутниковое ТВ, радары, холодильники, стиральные машины, микроволновые печи и видеоаппаратура, является кремний. Однако, кремний как полупроводниковый материал обладает как рядом преимуществ, так и рядом существенных недостатков. К неоспоримому преимуществу кремния можно отнести прежде всего то, что производство пластин из кремния для чипов и микросхем, их полировка, очистка и резка во всем мире хорошо освоены и поэтому приборы, изготовленные на основе пластин кремния недороги. К недостаткам кремния как полупроводникового материала можно отнести то, что с повышением окружающей температуры его полупроводниковые свойства сильно ухудшаются, появляется нестабильность в работе приборов и сбои. Кремний не стойкий к радиоактивным излучениям материал и, поэтому не может стабильно работать в условиях повышенной радиации, например, в космосе и на ядерных станциях. Обладает он также и рядом других неустраняемых недостатков. В связи с этим, в настоящее время идет интенсивный поиск других материалов, способных пусть не полностью, но, хотя бы, частично заменить кремний. Нужны не только стойкие к радиоактивным излучениям материалы, но и материалы, обладающие повышенной механической прочностью, высокими значениями модуля упругости, материалы, которые могут работать при высоких механических и ударных нагрузках, не меняя своих электрических и оптических свойств.

В связи с этим, в последнее время особый интерес вызывают такие полупроводниковые материалы как карбид кремния (SiC), нитрид галлия (GaN), нитрид алюминия (AlN), оксид галлия (Ga₂O₃) и ряд других материалов. Эти полупроводники обладают прекрасными электрическими характеристиками и могут обеспечить работу электронных и оптоэлектронных приборов в условиях повышенных температур и, в условиях повышенной радиации. Данные полупроводниковые материалы обладают высокой твердостью и высокими значениями модулей упругости. Карбид кремния, например, приближается по твердости к алмазу. Такие полупроводниковые материалы как: SiC, AlN, GaN и Ga₂O₃ обладают широкой запрещенной энергетической зоной. Ширина зоны этих материалов изменяется от 2,4 эВ для кубического SiC, до 6,1 эВ у AlN.

Поэтому эти полупроводниковые материалы называются широкозонными полупроводниками. Основным препятствием реализации высоких потенциальных возможностей широкозонных полупроводников является отсутствие технологий, позволяющих производить доступные по цене и качеству эпитаксиальные слои этих полупроводников. Кроме того, важно обеспечить и возможность интеграции широкозонных полупроводников с традиционной кремневой электроникой. Это необходимо для того, чтобы приборы с широкозонными структурами было бы возможно изготавливать на кремниевых подложках, технология производства которых и технология обработки в настоящее время доведены до совершенства. В настоящее время решением этой проблемы занимаются все промышленно развитые страны и крупнейшие электронные компании мира.

В 2004 г. лабораторией “Структурных и фазовых превращений в конденсированных средах” ИПМаш РАН были начаты исследования по разработке нового, ранее неизвестного, метода синтеза низкодефектных слоев одного из основных широкозонных полупроводников карбида кремния на кремниевой подложке. Целью этих исследований было создание нового типа подложек для изготовления на их основе различных типов полупроводниковых приборов и интегральных микросхем нового поколения на основе широкозонных полупроводников. В результате этих работ был открыт принципиально новый метод роста SiC на кремнии. Метод основан на согласованном замещении части атомов в кремнии на атомы углерода без разрушения кремниевой основы. По сути дела, впервые в мировой практике реализована последовательная согласованная замена атомов одного сорта другими атомами внутри приповерхностного слоя исходного кристалла без разрушения его кристаллической структуры.

Открытие данного метода позволяет синтезировать такие широкозонные полупроводники, как AlN, GaN и Ga₂O₃ и ряд твердых растворов этих соединений на кремниевой подложке, покрытой буферным слоем SiC. Это открывает беспрецедентные возможности для создания нового типа приборов.

В процессе синтеза, как самого буферного слоя SiC, так и последующих слоев AlN, GaN и Ga₂O₃ образуются различного рода дефекты, а именно: микро и нано-трещины, дефекты упаковки кристаллических решеток и т.п. Наличие подобного рода дефектов не допустимо при производстве полупроводниковых и оптоэлектронных приборов.

В процессе выращивания гетероструктур SiC, AlN, GaN и Ga₂O₃ на кремнии используются химические реакции. Важным, поэтому, является определение условий, при которых рост пленки будет устойчивым. Основной сложностью при изготовлении наноматериалов являются, как малый размер их структурных

элементов, так и сильная зависимость их полупроводниковых свойств от флуктуаций состава, возникающих в процессе выращивания.

Флуктуации состава, возникающие в процессе роста гетероструктур приводят, в свою очередь, к неоднородностям их механических свойств. В связи с этим, встает острая необходимость в определении упругих механических и прочностных свойств тонких слоев SiC, AlN, GaN и Ga₂O₃, выращенных на кремниевой подложке.

Измерение механических характеристик в тонкопленочных, многослойных системах, в которых суммарная толщина всех слоев часто не превышает 100 нм, а толщины отдельных слоев могут быть и еще меньше (не более 10-20 нм) представляет сложную и, до настоящего времени не решенную задачу.

Экспериментальные исследования деформаций в наноматериалах (материалы характерный размер, которых не превышает 100 нм), возникающих в результате механических воздействий, является важным вкладом в механику деформируемого твердого тела. Действительно, с уменьшением размеров кристаллитов или толщины пленки, что соответствует нашему случаю, внешняя поверхность слоя пленки и граница раздела пленка–подложка будут приводить к изменению механических свойства материала, по сравнению со свойствами этого же материала в объемной фазе.

Интерес к этим исследованиям в последнее время возрастает, поскольку наноматериалы стали широко применяться в различных сферах современной жизни. Для использования наноматериалов в прикладных областях необходимо понимать отличие свойств наноматериалов от свойств этих же материалов, но находящихся в объемной фазе. Так, в работах И.А. Овидько, М.Ю. Гуткина, Б. Н. Семенова и А. Г. Шейнермана подробно описаны особенности релаксации напряжений, пластической деформации, зарождения и роста трещин, протекающих в наноматериалах под нагрузкой. В своей работе А. О. Бочкарев и М. А. Греков вывели обобщенную систему уравнений фон Кармана, описывающую изгиб нанопластины с учетом, возникающих на ее лицевых поверхностях упругих напряжений. Авторы теоретически показали, что упругие модули пластины, имеющей толщину в несколько десятков нанометров, отличаются от значений упругих модулей этого же материала, но находящегося в объемной фазе. Согласно теоретическим выводам работы упругие модули нанопластины могут как превышать величину упругих модулей объемного материала, из которого эта нанопластина изготовлена, так и принимать меньшие значения.

В настоящий момент, однако, практически полностью отсутствуют экспериментальные данные, которые могли бы подтвердить или отвергнуть теоретические выводы ряда работ о влиянии поверхностных напряжений на

механические характеристики тонких пленок. Если отдельные экспериментальные исследования упругих механических свойств пленок толщиной в несколько мкм и проводились, то упругие механические свойства пленок толщиной 100 нм и меньше вообще не исследовались. Тем более, не проводились исследования механических свойств полупроводниковых пленок SiC, AlN, GaN и Ga₂O₃, выращенных на кремниевой подложке с буферным слоем SiC. В литературных источниках отсутствуют данные о исследованиях механических свойств этих гетероструктур. Поскольку толщина слоя SiC не превышает 100 нм, то пленки SiC, синтезированные методом согласованного замещения атомов, могут выступать как хороший модельный объект при исследованиях механических свойств широкого класса наноструктур. Поэтому, полученные в ходе экспериментальных исследований деформаций, возникающих в гибридных подложках SiC/Si при вдавливании острого алмазного наконечника, экспериментальные данные, вносят существенный вклад в механику деформируемых твердых наноматериалов.

На сегодняшний день наиболее эффективной методикой измерения упругих свойств тонких пленок является метод наноиндентирования. Метод наноиндентирования положительно себя зарекомендовал, как простая и надежная экспериментальная методика измерения механических свойств твердых тел. Однако, даже в случае наноиндентирования пленок толщиной порядка 500 нм возникают сложности в точном определении упругих свойств материала пленки, вызванные именно наномасштабностью структуры, не говоря уже о более тонких слоях. Например, сложность измерения механических модулей пленки SiC, выращенной методом согласованного замещения атомов на подложке Si, связана с тем, что более твердая пленка SiC находится на более мягкой, да к тому же, пористой подложке Si. Требуется определенное «искусство» для того, чтобы выделить из общего сигнала (сигнал от пленки и подложки) прибора, сигнал, исходящий только от пленки. Малая толщина пленки и пористая структура подложки лишь усугубляют ситуацию. Следует отметить, что к анализу данных, полученных методом наноиндентирования следует относиться с некоторой долей осторожности. Это связано с тем, что при вдавливании наноиндентора на, подверженной вдавливанию поверхности кристалла, как правило, образуется «отпечатки», у кончиков которых могут образовываться зоны с повышенной концентрацией дислокаций, нанотрещин, вакансий и нанопор, что и было обнаружено в ряде работ. Это может привести к неточностям в измерениях механических модулей. Поэтому, необходимо иметь ввиду, что для точного нахождения механических свойств наноматериалов необходимо использовать иные методики анализа. В частности, в работе В.И.

Веттегрена и др. показано, что в процесс механического воздействия можно исследовать при помощи метода фрактолюминесценции.

Структура SiC на Si (SiC/Si), получаемая методом согласованного замещения атомов, не имеет аналогов. Это абсолютно новый, ранее никем не исследованный материал. В общем случае это композиционный материал, поэтому он является наиболее сложным и, в тоже время весьма интересным объектом для исследований большинства механических свойств. Экспериментальные исследования деформаций, происходящих в гибридных подложках SiC/Si, сформированных методом замещения атомов являются существенно новым уникальным вкладом в механику деформированного состояния. Новые данные о величине механических модулей, параметров и характеристик нового материала SiC/Si, с учетом отмеченных особенностей метода наноиндентирования, являются важным вкладом в мировую справочную базу данных механических свойств материалов.

С созданием метода согласованного замещения атомов открылась возможность развить новое направление—исследование механических свойств методом наноиндентирования целых классов новых материалов и широкозонных гетероструктур на кремниевой подложке. Так, в настоящий момент, для микро-и оптоэлектроники наиболее востребованными материалами является монокристаллы и монокристаллические пленки нитрида алюминия AlN и нитрида галлия GaN. Эти полупроводники широко применяются при создании высокоэффективных светодиодов, микротранзисторов нового поколения и других продуктов микро и оптоэлектроники. Однако, как правило, они выращиваются либо на подложках сапфира, либо, на дорогостоящих монокристаллах SiC. Использование для роста пленок AlN и GaN гибридных подложек SiC/Si, синтезированных с помощью согласованного замещения атомов, позволяет осуществить интеграцию традиционной кремниевой микроэлектроники с современными полупроводниковыми материалами.

Исследование деформационных свойств гетероструктур AlN/SiC/Si, GaN/SiC/Si и GaN/AlN/SiC/Si, сформированных на гибридных подложках SiC/Si до настоящего времени не проводилось и, это делает тему диссертации актуальной.

В последнее годы исследователи большое внимания уделяют получению эпитаксиальных пленок соединения оксида галлия моноклинной сингонии β -Ga₂O₃. Этот широкозонный полупроводниковый материал является весьма перспективным новым материалом и, благодаря ряду физических свойств, может составить конкуренцию таким полупроводникам, как нитриды алюминия и галлия. В рамках настоящей диссертации, на кремниевых подложках, с предварительно синтезированным на них буферным слоем карбида кремния SiC,

впервые, методом хлорид-гидридной эпитаксии (ХГЭ), были выращены пленки β -Ga₂O₃ и были проведены исследования их структурных и механических характеристик. Механические исследования эпитаксиальных слоев Ga₂O₃, выращенных на гибридных подложках с различными кристаллографическими направлениями (SiC/Si(001), SiC/Si(011) и SiC/Si(111)) ранее не проводились. Эти исследования являются актуальными, востребованными и открывают новые возможности для дальнейшего развития исследования в этом направлении.

Цели и задачи работы

Целями работы являются:

- 1) Разработать экспериментальную методику измерения твердости и модуля упругости твердых и жестких наномасштабных слоев на мягком и упругом пористом основании.
- 2) Измерить твердость и модуль упругости слоев нано-SiC, синтезированных на Si оригинальным методом согласованного замещения атомов.
- 3) Измерить твердость и модуль упругости тонких пленок AlN и GaN, сформированных методом ХГЭ на гибридных подложках нано-SiC/Si.
- 4) Изучить структурные свойства и механические характеристики эпитаксиальных слоев β -Ga₂O₃, сформированных методом ХГЭ на гибридных подложках SiC/Si(001), SiC/Si(011) и SiC/Si(111).

Степень разработанности темы исследования. В диссертации подробно описан процесс наноиндентирования пленок SiC, выращенных на Si методом замещения атомов. Топография поверхности SiC была исследована методом атомно-силовой микроскопии (АСМ), толщина слоя SiC измерялась, как с помощью анализа торцевых изображений, полученных на сканирующем электронном микроскопе, так и исходя из анализа эллипсометрических данных. Изучена и проанализирована упругая деформация поверхности нано-SiC и определен модуль упругости этого материала. С использованием метода Оливера и Фарра проанализированы экспериментальные данные по упругопластическому наноиндентированию нано-SiC. Построены экспериментальные зависимости эффективной твердости и приведенного модуля упругости от смещения индентора относительно исходной поверхности SiC. Исследованы деформационные свойства гибридных подложек SiC/Si, синтезированных с помощью согласованного замещения атомов и предложена методика измерения микротвердости пленки, и подложки для случая расположения жесткой пленки на мягкой подложке. При помощи метода наноиндентирования обнаружено, что поверхностная энергия С-границ кристалла 4H-SiC примерно в 1.5 раза выше поверхностной энергии грани другой полярности, а именно грани Si.

В диссертации описаны результаты исследования процесса наноиндентирования пленки GaN микронной толщины, выращенной на гибридной структуре SiC/Si с буферным слоем AlN. Исходная морфология поверхности пленки GaN и остаточные, от наноиндентирования отпечатки, были изучены с помощью АСМ. Данные по наноиндентированию, атомно-силовой микроскопии и рамановской спектроскопии были использованы при измерении механических свойств. В частности, по величине остаточной деформации (отпечаток от вдавливания) и величине остаточных напряжений в исследуемой структуре были получены зависимости твердости и модуля упругости гетероструктуры GaN/AlN/SiC/Si. Эти данные были получены при помощи моделирования с использованием однослойных подходов. Методом микро-рамановской конфокальной микроскопии было исследовано распределение механических напряжений, возникших вблизи отпечатка от вдавливания индентора в слой GaN, выращенные на SiC/Si. В результате были построены трехмерные карты этих напряжений для слоя GaN и, находящихся под ним слоев SiC/Si. Было обнаружено, что распределение напряжений в подложке имеет форму трилистника. Процесс возникновения данной формы напряжений под действием наноиндентора был промоделирован с помощью метода молекулярной динамики. Численные данные по эволюции морфологии формы напряжений согласуются с экспериментальными результатами, по эволюции морфологии, полученные методом микро-рамановской конфокальной микроскопии.

Научная новизна диссертационной работы заключается в следующем:

1. Предложена аппроксимационная модель, адекватно описывающая деформационные свойства наномасштабных двухслойных пленок, включая жесткие пленки на мягких подложках и, позволяющая с определенной степенью точности оценивать не только микротвердость пленки и подложки, но и толщину пленки.
2. Впервые, на примере пленок SiC на Si продемонстрировано, что метод наноиндентирования может быть использован для анализа деформационных характеристик не только пленок микронной толщины, но и пленок толщиной в несколько нанометров.
3. Впервые метод наноиндентирования был применен для измерения деформационных свойств и механических характеристик наномасштабных пленок SiC, синтезированных на подложках Si методом согласованного замещения атомов.
4. Впервые экспериментально определены значения модуля упругости и твердости наномасштабных слоев SiC, сформированных методом

согласованного замещения атомов внутри матрицы Si, для трех основных кристаллических плоскостей, а именно для (100), (110) и (111).

5. Впервые, методом наноиндентирования, в рамках точности данного метода, определены упругие модули и характеристики (модуль упругости, твердость, прочность) поверхностных слоев полупроводниковых гетероструктур AlN/SiC/Si, GaN/SiC/Si и GaN/AlN/SiC/Si, выращенных на гибридных подложках SiC/Si.

6. Разработана новая методика, позволяющая визуализировать остаточные механические напряжения в прозрачном и полупрозрачном кристалле вокруг отпечатка, сформированного в процессе наноиндентирования.

7. Впервые получены уникальные экспериментальные данные о структуре и упругопластических свойствах слоев нового материала β -Ga₂O₃, сформированных на слоях SiC, выращенных на поверхностях Si ориентаций (100), (110) и (111).

8. Впервые обнаружено, что кристалл β -Ga₂O₃ является ауксетиком, поскольку при некоторых направлениях растяжения его коэффициент Пуассона принимает отрицательные значения.

Теоретическая и практическая значимость работы заключается:

1. В возможности применения разработанных и экспериментально апробированных методик наноиндентирования для анализа механических свойств широкого класса пленок нанометровых толщин.

2. Впервые получены значения механических модулей таких широкозонных полупроводников как: SiC, AlN, GaN; и β -Ga₂O₃, выращенных на гибридной подложке SiC/Si.

3. В разработанной и экспериментальной проверенной аппроксимационной модели, позволяющей описать деформационные свойства наномасштабных двухслойных пленок, включая жесткие пленки на мягких подложках и, которая позволяет определить не только микротвердость пленки и подложки, но и толщину пленки.

4. Установлено, что разработанные методики могут быть применены для исследования механических свойств наномасштабных покрытий из золота, палладия и других металлов, используемых в различных приложениях не только для микроэлектроники, но и при создании новых защитных покрытий для различного типа деталей механизмов и биологических имплантатов.

5. Впервые экспериментально измерены значения твердости и модуля упругости пленок нового полупроводникового материала β -Ga₂O₃, сформированных на нано-SiC на Si.

Методология и методы исследования.

В работе использованы следующие методы исследования: наноиндентирование, атомно-силовой микроскопия, электронная сканирующая микроскопия, спектральная эллипсометрия, Рамановская микроскопия.

Положения, выносимые на защиту:

1. Аппроксимационная модель, которая адекватно описывает деформационные свойства наномасштабных двухслойных пленок, включая жесткие пленки на мягких подложках и позволяет определять не только микротвердость пленки и подложки, но и толщину пленки.
2. Метод наноиндентирования, разработанный на примере наномасштабных пленок SiC выращенных на Si, который может быть использован для анализа упругих свойств и определения механических модулей (упругости, прочности и твердости) наномасштабных пленок целого класса различных соединений.
3. Обнаружены особенности в механических свойствах тонких пленок AlN и GaN, в частности, в их твердости и значениях модулей упругости, выращенных на гибридной подложке SiC/Si с порами на межфазной границе.
4. Экспериментально установлено, что метод наноиндентирования позволяет выявить различие в модулях упругости различных полярных граней гексагонального монокристалла 4H-SiC, а именно C-границы (000 $\bar{1}$) и Si-границы (0001) и определить количественное различие в значениях поверхностных энергий C-граней и Si граней гексагональных SiC кристаллов.
5. Экспериментально измерены значения механических и деформационных свойств (твердости и модуля упругости) эпитаксиальных слоев нового широкозонного полупроводникового соединения β -Ga₂O₃, сформированного на подложках SiC/Si ориентаций (001), (011) и (111).

Степень достоверности и апробация результатов.

Достоверность результатов, представленных в настоящей диссертации, обуславливается применением хорошо освоенных экспериментальных методик для решения поставленных задач, соблюдением общепринятых стандартов в соответствии, с которыми работают данные методики и согласованием полученных результатов с литературными данными.

Основные результаты были представлены на 12 международных и всероссийских научных конференциях: 1) XVIII Research Workshop «Nucleation Theory and Applications» (Дубна, Россия, 12-20 апреля 2014); 2) XXI Всероссийская научно-техническая конференция с международным участием «Вакуумная техника и технологии – 2014» (Санкт-Петербург, Россия, 17-19 июня 2014); 3) XIX международный симпозиум «Нанофизика и наноэлектроника» (Нижний Новгород, Россия, 10-14 марта 2015); 4) XIX Research Workshop «Nucleation Theory and Applications» (Дубна, Россия, 11-18 апреля 2015); 5) XII

международная конференция «Пленки и покрытия – 2015» (Санкт-Петербург, Россия, 19-22 мая 2015); 6) XI Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики (Казань, Россия, 20-24 августа 2015); 7) XX Research Workshop «Nucleation Theory and Applications» (Дубна, Россия, 16-23 апреля 2016); 8) Всероссийская конференция молодых ученых-механиков (Сочи, Россия, 5-15 сентября 2017); 9) 6th International school and conference «Saint Petersburg OPEN 2019» (Санкт-Петербург, Россия, 22 – 25 апреля, 2019); 10) International conference «Mechanisms and non-linear problems of nucleation and growth of crystals and thin films» (Санкт-Петербург, Россия, 1 – 5 июля, 2019) ; 11) 8th International school and conference «Saint Petersburg OPEN 2019» (Санкт-Петербург, Россия, 27 – 30 апреля, 2021); 12) 15 International conference «Films and Coatings - 2021» (St.-Petersburg, Russia, 18 – 20 may, 2021)

Личный вклад автора.

Все основные экспериментальные результаты были получены лично автором. Автор самостоятельно синтезировал пленки SiC на подложках Si с кристаллической ориентацией (001), (011) и (111) и подготавливал образцы для экспериментальных измерений. Исследования на наноинденторе, атомно-силовом микроскопе и оптическом профилометре проводились лично автором. Выбор направлений исследований, обсуждение результатов и формулировка задач проводилась совместно с научным руководителем д.ф.-м.н., профессором С.А. Кукушкиным. Обсуждение ряда вопросов, касающихся анализа кривых наноиндентирования и эллипсометрических зависимостей, обсуждались совместно с д.ф.-м.н., г.н.с. А.В. Осиповым и научным руководителем. Численные расчеты обсуждались с д.ф.-м.н., г.н.с. А.В. Осиповым и с.н.с., к.ф.-м.н. А.В. Редьковым. Метод визуализации упругих деформаций и измерения при помощи рамановской спектроскопии проводились совместно с с.н.с., к.ф.-м.н. А.В. Редьковым. Рост пленок GaN, AlN и β -Ga₂O₃ на подложках SiC/Si методом хлорид-гидридной эпитаксии осуществлялся со с.н.с., к.ф.-м.н. Ш.Ш. Шарофидиновым.

Публикации.

По теме диссертации опубликовано двенадцать печатных работ в изданиях из перечня рецензируемых научных журналов ВАК и индексируемых в базе данных Scopus.

Структура и объем диссертации.

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Объем диссертации составляет 140 страницы и содержит 46 рисунков, 8 таблиц, список литературы включает 129 источников.

Диссертация является законченной научной работой и соответствует критериям ВАК, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук по специальности 1.1.8 (ранее 01.02.04) «Механика деформируемого твердого тела».

Основное содержание работы

Во введении обоснована актуальность темы, сформулирована цель работы и задачи исследования, научная новизна диссертационной работы, выносимые на защиту научные положения и результаты, дана краткая аннотация по главам и краткий обзор работ, касающихся темы диссертации.

В первой главе приведено описание истории создания и развития метода наноиндентирования (НИ). Описываются экспериментальные методики и подходы, используемые в методе НИ. Приводятся данные по устройству приборов, на которых осуществляется НИ. Описывается устройство конкретного прибора, на котором проводились измерения механических свойств кристаллических структур, анализируемых в диссертации. Приводится анализ экспериментальных данных, получаемых в результате НИ и описаны основные этапы процесса НИ. Рассмотрены основные ошибки, возникающие при регистрации данных НИ, связанные как с параметрами эксперимента, так и со структурными особенностями исследуемого образца. Описано влияние на экспериментальные зависимости НИ ползучести, температурного расширения и шероховатости поверхности исследуемого образца. Описан способ определения реального смещения индентора относительно исходной поверхности образца при регистрации первой экспериментальной точки с минимальной нагрузкой (начальной глубины индентирования) и методика учета фактической геометрии наконечника (индентора). Приведено описание основных методик анализа данных НИ, как для чисто упругого вдавливания, так и в случае упругопластической деформации. В том числе в первой главе приведено описание методов Герца, Оливера-Фарра и измерения эффективной микротвердости материала. Рассмотрено приложения НИ для исследования механических характеристик тонких пленок и покрытий. Подробно описаны методы анализа данных по НИ структур пленка-подложка. Приведен анализ методов измерения значений твердости и модуля упругости тонкопленочных структур, нанесенных на объемное твердое основание с учетом влияния материала подложки.

В первой главе диссертации приведено описание метода согласованного замещения атомов, который позволяет синтезировать наномасштабные слои монокристаллического карбида кремния (SiC) внутри матрицы кремния (Si). Рассмотрено историческое развитие метода и сформулирована его основная научная концепция. Приводится описание конструкции экспериментальных установок, позволяющих синтезировать наномасштабные слои SiC внутри кристаллической матрицы Si по методу согласованного замещения атомов.

Представлены экспериментальные данные исследований структурных особенностей гибридных подложек SiC/Si и кристаллического совершенства слоев нано-SiC, полученных методом согласованного замещения атомов.

На рисунке 1 приведено изображение поверхности пленки SiC, полученное с помощью метода атомно-силовой микроскопии (АСМ) и типичное изображение торцевого скола гибридной подложки SiC/Si, полученное при помощи сканирующего электронного микроскопа (СЭМ).

Также в первой главе описан метод хлорид-гидридной газофазной эпитаксии (ХГЭ), рассмотрены его основные принципы и конструкция экспериментальных установок, позволяющих осуществлять рост пленок и объемных кристаллов по методу ХГЭ. Представлены экспериментальные условия, при которых на поверхности гибридных подложек SiC/Si формировались тонкие слои широкозонных полупроводников AlN, GaN и β -Ga₂O₃, исследуемые в последующих главах. Описаны экспериментальные методики роста пленок AlN, GaN и β -Ga₂O₃ на гибридных подложках SiC/Si.

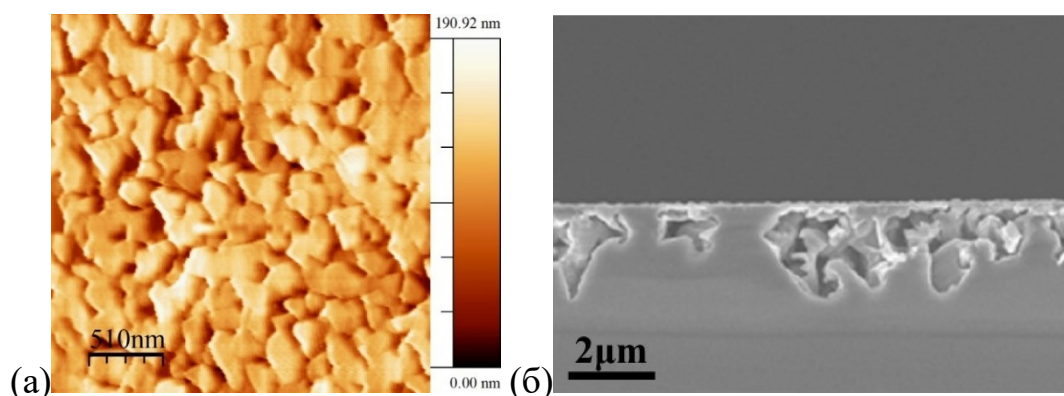


Рисунок 1 (а) АСМ-изображение поверхности пленок SiC синтезированных методом замещения атомов на Si(111), (б) СЭМ-изображение торцевого скола гибридной подложки SiC/Si(111) синтезированной методом замещения атомов.

Вторая глава посвящена исследованию механических свойств наномасштабных пленок SiC методом НИ. В рамках настоящей главы представлены экспериментальные данные НИ и рассчитаны значения твердости и модуля упругости объемной монокристаллической пластины SiC-4H политипа со стороны Si и C-полярных граней. Показано, что полярность поверхности кристалла SiC существенно влияет на характер начального этапа деформации. Экспериментально установлено, что модуль упругости поверхности C-полярной грани кристалла 4H-SiC в 2.3 раза больше, чем модуль упругости поверхности со стороны Si-полярной грани. Измерены механические характеристики монокристаллов Si трех основных кристаллографических направлений. Показано, что значения твердости и модуля упругости пластин Si разных кристаллографических направлений, типов проводимости, способов и

концентрации легирования могут существенно отличаться. Зарегистрированы фазовые превращения, происходящие в кремнии при давлении на кристалл от 4 до 8 ГПа. Методом АСМ исследованы структурные характеристики поверхности пленок SiC, сформированных внутри кристаллической матрицы пластин Si ориентированных в трех основных кристаллографических направлениях. Проведены измерения и анализ деформации происходящей в результате НИ гибридных структур нано-SiC/Si(001), нано-SiC/Si(011) и нано-SiC/Si(111), синтезированных методом согласованного замещения атомов. Для гибридных подложек нано-SiC/Si(001) и нано-SiC/Si(111) были построены экспериментальные зависимости средних значений твердости и модуля упругости в зависимости от глубины отпечатка на которой индентор контактирует с материалом образца (контактная глубина h_c). При наноиндентировании структур пленка–подложка были получены комбинированные значения твердости и модуля упругости, то есть величины, в которых есть вклад, как от материала пленки, так и от материала подложки. Такие параметры в литературе называются эффективными. Зависимость средней эффективной твердости $H_{эфф}$ и среднего эффективного модуля упругости $E_{эфф}$ от контактной глубины проникновения гибридной подложки SiC/Si(001) – рисунок 2 и SiC/Si(111) – рисунок 3 были проанализированы с помощью следующих аппроксимационных моделей:

$$H_{эфф}(h_c) = H_{подл} + (H_{пл} - H_{подл}) \exp \left[- \left(\frac{H_{пл}}{H_{подл}} \frac{h_c}{\alpha t} \right)^n \right], \quad (1)$$

$$H_{эфф}(h_c) = H_{подл} + \frac{(H_{пл} - H_{подл})}{1 + \frac{t}{k} \left(\frac{h_c}{t} \right)^2}, \quad (2)$$

$$E_{эфф}(h_c) = \frac{(1 - \nu_{пл}^2)}{E_{пл}} \left(1 - e^{-\gamma_m \cdot (t/h_c)^{2/3}} \right) + \frac{(1 - \nu_{подл}^2)}{E_{подл}} \left(e^{-\gamma_m \cdot (t/h_c)^{2/3}} \right) + \frac{(1 - \nu_i^2)}{E_i}, \quad (3)$$

$$E_{эфф}(h_c) = E_{подл} + (E_{пл} - E_{подл}) \cdot I_0 \left(\frac{t}{\varepsilon \cdot h_c} \right), \quad (4)$$

$$I_0(x) = \frac{2}{\pi} \tan^{-1} x + \left[(1 - 2\nu(x)) \cdot x \cdot \ln \left(\frac{1+x^2}{x^2} \right) - \frac{x}{1+x^2} \right] \left(\frac{1}{2\pi(1-\nu(x))} \right),$$

$$\nu(x) = 1 - \frac{(1 - \nu_{подл}) \cdot (1 - \nu_{пл})}{1 - (1 - I_1(x)) \cdot \nu_{пл} - I_1(x) \cdot \nu_{подл}},$$

$$I_1(x) = \frac{2}{\pi} \cdot \operatorname{atan}(x) + \frac{x}{\pi} \cdot \ln \left(\frac{1+x^2}{x^2} \right),$$

где $H_{подл}$ и $H_{пл}$ твердость материала подложки и пленки соответственно, t – толщина пленки, h_c – контактная глубина проникновения индентора в образец, n и $\alpha = (Y_{пл}/Y_{подл}) \sqrt{E_{пл}/E_{подл}}$ – безразмерные константы, $Y_{пл}$ и $Y_{подл}$ – пределы текучести материала пленки и подложки, $E_{пл}$ и $E_{подл}$ – модули упругости пленки и подложки соответственно, k – параметр имеющий размерность длины и зависящий от механических характеристик пленки и

подложки, $\nu_{\text{подл}}$ и $\nu_{\text{пл}}$ – коэффициенты Пуассона материала пленки и подложки соответственно, γ_m и ε – безразмерные коэффициенты. Аппроксимационная функция (1), получена путем модификации функции, которая моделирует экспериментальную зависимость $H_{\text{эфф}}(h_c)$ для случая твердой пленки микронной толщины на мягкой подложке. Эта функция получена с помощью метода конечных элементов. Зависимость (2) основана на энергетическом подходе и апробирована на различных тонкопленочных структурах. Эта модель позволяет не только определить твердость пленки, но и сделать некоторые заключения относительно доминирующих механизмов деформации (преобладает пластичность или растрескивание). Влияние механических свойств материала подложки на измерения модуля упругости тонкой пленки методом НИ экспериментально исследовали Doerner и Nix. В рамках данного исследования авторы предложили эмпирическую модель, описываемую выражением (3), с помощью которой достаточно точно можно промоделировать зависимость $E_{\text{эфф}}(h_c)$ структуры пленка-подложка, полученную при НИ. Модель для эффективного модуля упругости (4) Huajian Gao, Cheng-Hsin Chiu и Jin Lee получили, используя метод модульного возмущения. Сопоставляя, экспериментально полученные зависимости $H_{\text{эфф}}(h_c)$ и $E_{\text{эфф}}(h_c)$ с модельными уравнениями (1)–(4), в диссертации были определены средние значения твердости и модуля упругости как самих слоев нано-SiC, так и переходных, между SiC и Si, слоев Si(001) и Si(111), находящихся под слоем SiC. Отметим, что для получения более правдоподобных значений при анализе кривых НИ был использован метод наименьших квадратов. Была, кроме того, исследована и зависимость универсальной твердости H_y (отношение приложенной нагрузки к боковой площади отпечатка) и истинной твердости H_i (отношение приложенной нагрузки к объему отпечатка) гибридной подложки SiC/Si(001) от смещения индентора относительно исходной поверхности образца. Проведено сравнение зависимостей $H_y(h)$ и $H_i(h)$, полученных в результате НИ гибридной подложки SiC/Si(001) и монокристаллических пластин 4H-SiC со стороны C-полярной и Si-полярной граней. Из рисунка 2 видно, что экспериментальные данные хорошо совпадают с расчетными данными, вычисленными по аппроксимационным моделям.

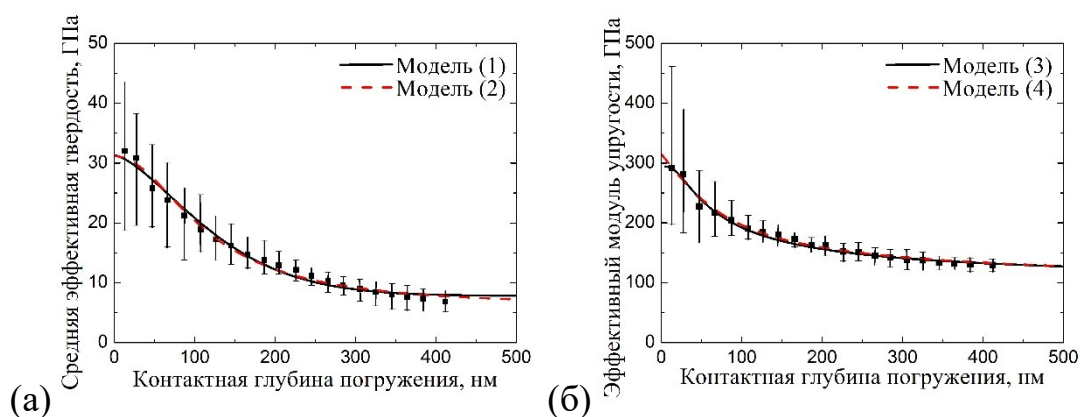


Рисунок 2 (а) Зависимость средних значений эффективной твердости и (б) зависимость средних значений приведенного модуля упругости от глубины погружения с аппроксимационными моделями для гибридной подложки SiC/Si(001).

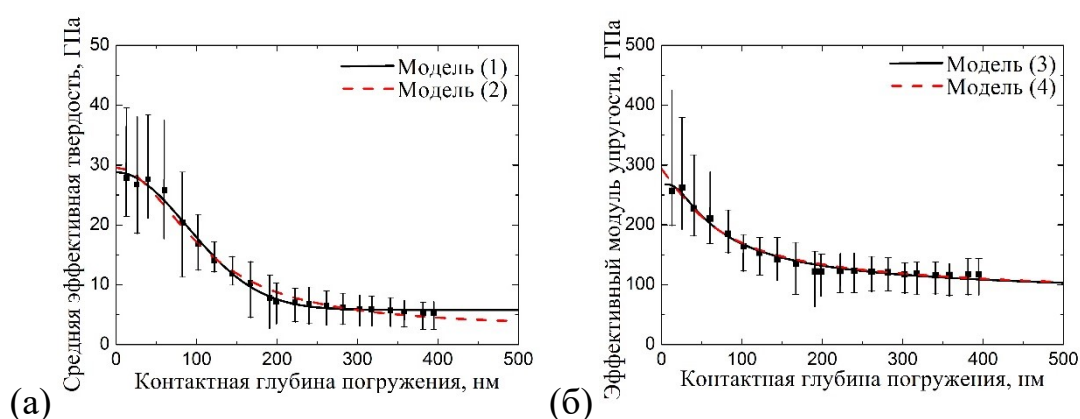


Рисунок 3 (а) Зависимость средних значений эффективной твердости и (б) зависимость средних значений приведенного модуля упругости от глубины погружения с аппроксимационными моделями для гибридной подложки SiC/Si(111).

Проведены исследования деформационных характеристик гибридной структуры SiC/Si(011) и показано, что эффективная микротвердость $H_{\text{мкр}}$ (отношение приложенной нагрузки к площади проекции отпечатка) и поверхностный модуль упругости $E_{\text{пов}}$ (модуль упругости определяемый в начальный момент вдавливания, когда деформация имеет условно упругий характер) образца SiC/Si(011) на 20% меньше, чем у исходной пластины Si(011). Изучены деформационные свойства гибридных подложек SiC/Si(111) и разработан метод НИ твердых и жестких наномасштабных пленок на подложке из более мягкого и эластичного материала. Найдены значения $H_{\text{мкр}}$ нано-SiC и слоя модифицированного в результате синтеза слоя Si(111). Показано, что экспериментальные данные, полученные на гибридной подложке SiC/Si, не совпадают с аппроксимационной моделью, развитой для однослойных систем (1). Между ними есть существенные расхождения. Для преодоления этого расхождения была разработана аппроксимационная модель, описывающая микротвердость двухслойной пленки, лежащей на подложке, в зависимости от

глубины погружения наноиндентора. Зависимость микротвердости от глубины погружения наноиндентора описывается уравнение (5)

$$H(h) = H_s + (H_1 - H_s) \exp \left[- \left(\frac{\mu_1 h}{t_1} \right)^{k_1} \right] + (H_2 - H_s) \exp \left[- \left(\frac{\mu_2 h}{t_2} \right)^{k_2} \right] \left(1 - \exp \left[- \left(\frac{\mu_1 h}{t_1} \right)^{k_1} \right] \right), \quad (5)$$

где H_s — микротвердость подложки, H_1 — микротвердость верхнего слоя толщиной t_1 , H_2 — микротвердость нижнего слоя толщиной t_2 . С помощью модели (5) описаны деформационные характеристики двухслойной нанопленки SiC, синтезированной внутри кристаллической матрицы подложки Si(111) методом согласованного замещения атомов. Определены микротвердости каждого слоя пленки SiC, а также слоя модифицированного кремния, играющего роль подложки. Методом наноиндентирования определены толщины каждого слоя пленки SiC и показано хорошее соответствие между данными индентирования и спектральной эллипсометрии. Исследована условно упругая деформация, образующаяся на начальном этапе от вдавливания при НИ гибридных структур SiC/Si(001) и SiC/Si(111). Рассчитаны значения $E_{\text{пов}}$ слоев нано-SiC, сформированных внутри кристаллических матриц Si ориентированных вдоль кристаллографических направлений (001) и (111).

В третьей главе рассматривается НИ тонких пленок широкозонных полупроводников нитрида алюминия (AlN) и нитрида галлия (GaN), сформированных методом ХГЭ на базе гибридных структур SiC/Si. Кроме того, описываются механические свойства слоя GaN микронной толщины, выращенной на гибридной подложке SiC/Si с предварительно нанесенным наномасштабным буферным слоем AlN. Методом АСМ исследована структура поверхности, как пленок AlN и GaN, так и гибридных подложек SiC/Si, на которых были сформированы слои AlN и GaN. В диссертации приведены АСМ-изображения поверхности гетероструктур AlN/SiC/Si, GaN/SiC/Si и GaN/AlN/SiC/Si и рассчитана их шероховатость. Для всех исследуемых полупроводниковых гетероструктур из данных, полученных методом НИ, были построены экспериментальные зависимости $H_{\text{эфф}}(h_c)$ и $E_{\text{эфф}}(h_c)$. Экспериментальные зависимости $H_{\text{эфф}}(h_c)$ и $E_{\text{эфф}}(h_c)$, построенные и были сопоставлены с аппроксимационными моделями (1), (2), (3) и (4). По этим параметрам были определены значения твердости и модуля упругости тонких пленок AlN и GaN, выращенных непосредственно на гибридных подложках SiC/Si и пленки GaN микронной толщины, сформированной на структуре SiC/Si с буферным слоем AlN. Для пленок проведено исследование начального сегмента НИ и рассчитаны значения $E_{\text{пов}}$ пленок AlN и GaN, выращенных непосредственно на SiC/Si и слоя GaN, сформированного на гетероструктуре

AlN/SiC/Si. В этой главе исследована НИ сложной комплексной гетероструктуры GaN/AlN/SiC/Si. В главе приведены данные по измерению деформации, оставшейся в результате вдавливания наноиндентора. Для этого образца представлены экспериментальные зависимости $H_y(h)$ и $H_n(h)$, на которых отчетливо наблюдается упругопластический переход деформации в виде появления на монотонных зависимостях кинетических кривых НИ, так называемого «зуба текучести». «Зуб текучести» появляется на кривых НИ при давлении равном 27 – 30 ГПа. Методом АСМ проведены измерения характерных размеров отпечатков, оставшихся после НИ с максимальной силой вдавливания 50 – 500 мН. На АСМ изображении остаточного отпечатка, сформированного за счет вдавливания индентора с максимальной силой 500 мН. При этом были зарегистрированы трещины, образовавшиеся в пленке GaN в результате НИ. По размерам трещин, зарегистрированных при помощи АСМ рассчитаны значения трещиностойкости (K_c) пленки GaN, выращенной на гетероструктуре AlN/SiC/Si вдоль соответствующих кристаллографических направлений. Трещиностойкость пленки GaN рассчитывалась по следующей формуле:

$$K_c = 0.016 \left(\frac{a}{l} \right)^{1/2} \left(\frac{E}{H} \right)^{2/3} \frac{F_{\max}}{c^{3/2}}, \quad (6)$$

где a – расстояние от центра отпечатка, полученного вдавливанием наноиндентора до его края, l – длина трещины от угла отпечатка до конца трещины и c – расстояние от центра отпечатка до конца трещины. Значения H и E пленки GaN брали из данных, полученных с помощью анализа методом Оливера и Фарра кривых НИ, максимальная глубина погружения которых не превышала 10% от толщины слоя GaN. Длина от центра отпечатка до его края и длину трещины измеряли с помощью анализа АСМ изображения.

Приводится описание новой методики процесса НИ гетероструктуры GaN/AlN/SiC/Si. Методика основана на визуализации остаточных напряжения области пленки, в которой производилось вдавливание и около нее. С помощью микро-рамановской техники были сняты карты распределения рамановских спектров вокруг следов от НИ. Были исследованы рамановские спектры, как вдали от зоны, в которой проходило НИ, так и в центре отпечатка, который остался после вдавливания с максимальной силой 500 мН. На основании анализа спектров была получена информация о распределении механических напряжений в пленке GaN и подложке кремния. На рисунке 4 представлено оптическое изображение следов индентора, полученных при разной силе укола 50, 200, 400 и 500 мН. Рамановские пики от слоя GaN (567 см^{-1}) и кремния (520 см^{-1}) аппроксимировались функцией Гаусса. В диссертации приведены изображения карт распределения рамановских спектров, построенных по линиям

GaN и Si для уколов наноиндентора различной интенсивности. На рисунке 4 приведены изображения этих спектров, как в зависимости от ширины пика интенсивности рамановского спектра на его на полувысоте (FWHM), так и его положения на оси частот.

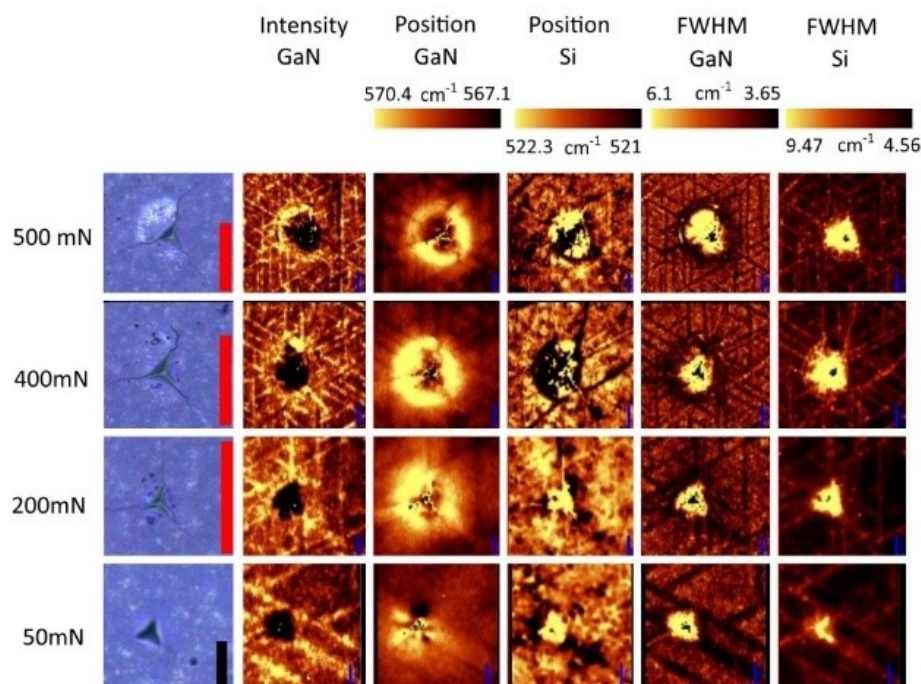


Рисунок 4 оптическое изображение и рамановские карты (80 на 80 точек) для уколов с разной силой по интенсивности, положению и FWHM линий кремния (520 cm^{-1}), и нитрида галлия (567 cm^{-1}). Красная масштабная линейка соответствует 10 мкм, черная – 5 мкм.

На рисунке 5 приведены изображения серии конфокальных рамановских карт и изображения распределений механических напряжений, построенных в зависимости от величины укола (для укола, сделанного с максимальной силой 200мН) и глубины погружения наноиндентора в образец. В диссертации приведены результаты компьютерного моделирования процесса НИ тонкой пленки методами молекулярной динамики и показано хорошее соответствие результатов моделирования и экспериментальных данных Рамановской спектроскопии по градиенту, вдоль поверхности подложки, распределения механических напряжений в гетереструктуре GaN/AlN/SiC/Si после НИ.

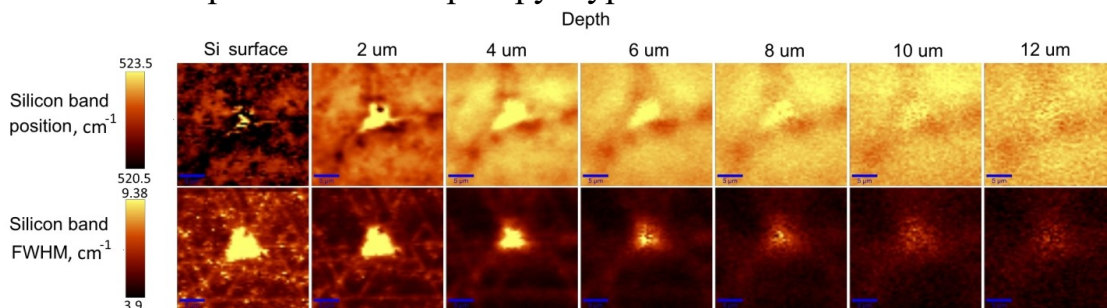


Рисунок 5 зависимость положения пика кремния (521 cm^{-1}) и его полуширины (FWHM) от глубины для укола, сделанного с максимальной силой 200мН.

В третьей главе представлены исследования относительной твердости (твердость рассчитанная относительно твердости материала с известными характеристиками) гибридной подложки SiC/Si и тонкой пленки AlN, сформированной на ранее упомянутой структуре SiC/Si, с помощью метода склерометрии. Склерометрия –царапание на микро (наномасштабном) уровне позволяет быстро и наглядно характеризовать микро- или нанотвердость различных структурных составляющих, выявлять упрочнение у границ кристаллов, изучать анизотропию кристаллов, характеризовать износостойкость точнее, чем методом с использованием метода НИ. В рамках этого исследования проведено измерение поверхности исследуемых структур методом АСМ. Рассчитана относительная твердость наномасштабной пленки SiC, модифицированного слоя Si под слоем SiC и тонкой пленки AlN. Построены зависимости относительной твердости от глубины погружения индентора. Показано, что до тех пор, пока царапание происходит непосредственно внутри пленки SiC, ее относительная твердость равна 30.8 ± 2.3 ГПа. Затем, по мере погружения в глубь слоя, твердость плавно уменьшается до величины 8,7 ГПа, что на 22% меньше чем твердость калибровочной кремниевой подложки 11.2 ГПа, измеренная методом НИ. Аналогичные измерения на пленке AlN показали, что ее относительная твердость во всем диапазоне глубин равна 20.5 ± 3.5 ГПа.

Четвертая глава посвящена исследованию механических свойств и структурных характеристик тонких пленок оксида галлия β модификации (β -Ga₂O₃) выращенных методом ХГЭ на кремниевых подложках с кристаллографическими направлениями (001), (011) и (111), на которых предварительно с помощью согласованного замещения атомов были сформированы наномасштабные слои SiC. В главе описаны проведенные исследования механических характеристик пленок β -Ga₂O₃, сформированных на подложках сапфира (Al₂O₃) с ориентацией ростовой поверхности ($\bar{2}01$) и ($\bar{3}11$). В главе приведен анализ Рамановских спектров структур β -Ga₂O₃/Al₂O₃, рассчитаны значения их твердости, объемный и поверхностный модули упругости.

Проведены исследования структурного и кристаллического качества слоев β -Ga₂O₃, выращенных методом ХГЭ на гибридных подложках SiC/Si. Методом АСМ измерена морфология поверхности пленок β -Ga₂O₃, нанесенных на гибридные подложки SiC/Si и рассчитана их шероховатость. Исследованы СЭМ-изображения, снятые с торца гетероструктур β -Ga₂O₃/SiC/Si. По данным СЭМ определена толщина слоев β -Ga₂O₃, выращенных на гибридных структурах SiC/Si(001), SiC/Si(011) и SiC/Si(111). Методом НИ измерены механические характеристики и деформационные свойства слоев β -Ga₂O₃, выращенных на принципиально разных кристаллографических направлениях Si. Исследован

упругий сегмент вдавливания и с помощью соотношения Герца рассчитаны значения $E_{\text{пов}}$ пленок $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ разных кристаллографических ориентаций. Методом Оливера и Фарра проанализированы данные НИ упругопластического характера и рассчитаны значения твердости и модуля упругости слоев $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$. Экспериментально показано, что механические свойства кристаллических структур $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ зависят от их кристаллической ориентации. Показано, что пленка $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, сформированная на гибридной структуре SiC /Si(001) является наиболее жесткой и твердой, а слой $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ на подложке SiC/Si(111) напротив является наиболее эластичным и мягким.

В диссертации приведены квантово-химические расчеты упругих свойств кристаллических структур $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ для кристаллографических направлений $\langle 100 \rangle$, $\langle 010 \rangle$ и $\langle 001 \rangle$. При помощи численных методов квантовой химии вычислен тензор упругости c_{ij} и тензор податливости s_{ij} кристалла $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ обладающего моноклинной симметрией. По тензору упругости были визуализированы поверхности модуля Юнга, линейной сжимаемости, наибольшего возможного и наименьшего возможного значений коэффициента Пуассона и наибольшего возможного и наименьшего возможного значений модуля сдвига кристаллической структуры $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$.

Моделирование упругих свойств кристалла $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ методами квантовой химии показало, что они являются сильно анизотропными. В частности, модуль Юнга в направлении $\langle 100 \rangle$ равен 120 ГПа и близок к минимальному модулю упругости 119 ГПа (который соответствует направлению $\langle -1, 0, -0.07 \rangle$ в стандартной ориентации). Расчетное значение модуля Юнга, совпадает с экспериментально измеренным значением модуля упругости $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, равным $E=120$ ГПа, который был выращен на гибридной подложке SiC/Si(111). Кроме того, прямоугольная огранка кристаллов $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ в этом случае как раз соответствует направлению $\langle 100 \rangle$ в стандартной ориентации. Поэтому, можно сделать вывод о том, что на подложке SiC/Si(111) оксид галлия преимущественно растет в направлении $\langle 100 \rangle$. Измеренный коэффициент твердости $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ в этом случае $H=9$ ГПа также в пределах погрешности совпадает с коэффициентом твердости в направлении $\langle 100 \rangle$ $H=10.7$ ГПа, 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 (010) с теоретическим модулем Юнга $E=268$ ГПа. Различие между этим значением и экспериментально измеренным $E=215$ ГПа может объясняться не только отличием ориентации оксида галлия от

направления $\langle 010 \rangle$, 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. Показано, что данные моделирования методами квантовой химии практически совпадают с экспериментальными данными, полученными методом НИ, что свидетельствует о том, что упругопластические свойства пленок $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, выращенных на подложках Si с буферным слоем SiC близки к упругопластическим свойствам объемных кристаллов.

Заключение

В диссертационной работе проведены систематические исследования механических свойств пленок и гетероструктур широкозонных полупроводников SiC/Si, AlN/SiC/Si, GaN/SiC/Si, GaN/AlN/SiC/Si, $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ /SiC/Si. В результате исследований были получены следующие результаты.

1. Разработана методика наноиндентирования наномасштабных слоев SiC, синтезированных внутри кристаллической матрицы Si с помощью согласованного замещения атомов. Определены основные механические характеристики нано-SiC на Si и изучены деформационные особенности процесса вдавливания наноиндентора в гибридные структуры SiC/Si.
2. Показано, что стандартная модель, описывающая однослойные структуры, не согласуется с экспериментальными данными для гибридной системы SiC/Si.
3. Разработана аппроксимационная модель, удовлетворительным образом, описывающая экспериментальные данные по НИ двухслойных образцов.
4. Исследованы упругие механические свойства поверхности пленок нано-SiC, синтезированных на пластинах Si с кристаллографическими направлениями (001), (110) и (111).
5. Впервые, методом наноиндентирования, измерены значения твердостей и модулей упругости поверхностных слоев широкого спектра полупроводниковых гетероструктур AlN/SiC/Si, GaN/SiC/Si, GaN/AlN/SiC/Si и $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ /SiC/Si, выращенных на гибридных подложках SiC/Si.

Работы, опубликованные автором по теме диссертации

В изданиях, рекомендованных ВАК при МОиН РФ:

- 1) Гращенко А. С., Кукушкин С. А., Осипов А. В. Наноиндентирование и деформационные свойства наномасштабных пленок карбида кремния на кремнии //Письма в Журнал технической физики. – 2014. – Т. 40. – №. 24. – С. 53-59; 2) Grashchenko A. S., Kukushkin S. A., Osipov A. V. Microhardness study of two-layer nanostructures by a nanoindentation method //Materials Physics & Mechanics. – 2015. – Т. 24. – №. 1. – С. 35-40; 3) Гузилова Л. И. и др. Исследование

эпитаксиальных слоев и монокристаллов β -Ga₂O₃ методом наноиндентирования //Materials Physics and Mechanics. – 2016. – Т. 29. – №. 2. – С. 166; 4) Grashchenko A. S. et al. Nanoindentation of GaN/SiC thin films on silicon substrate //Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 2017. – Т. 102. – С. 151-156; 5) Osipov A. V. et al. Structural and elastoplastic properties of β -Ga₂O₃ films grown on hybrid SiC/Si substrates //Continuum Mechanics and Thermodynamics. – 2018. – Т. 30. – №. 5. – С. 1059-1068; 6) Гращенко А. С. и др. Исследование анизотропных упругопластических свойств пленок β -Ga₂O₃, синтезированных на подложках SiC/Si //Физика твердого тела. – 2018. – Т. 60. – №. 5. – С. 851-856; 7) Кукушкин С. А. и др. Исследование физико-механических характеристик наномасштабных пленок методом наноиндентирования //Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. – 2018. – №. 5. – С. 5-14; 8) Редьков А. В. и др. Эволюция ансамбля микропор в структуре SiC/Si в процессе роста методом замещения атомов //Физика твердого тела. – 2019. – Т. 61. – №. 3. – С. 433-440; 9) Гращенко А. С., Кукушкин С. А., Осипов А. В. Исследование упругих свойств пленок SiC, синтезированных на подложках Si методом замещения атомов //Физика твердого тела. – 2019. – Т. 61. – №. 12. – С. 2313-2315; 10) Гращенко А. С., Кукушкин С. А., Осипов А. В. Упругие свойства пленок GaN и AlN, сформированных на пористом основании–гибридной подложке SiC/Si //Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. – 2020. – №. 2. – С. 3-9; 11) Осипов А. В. и др. Исследование методом наноиндентирования твердости и модуля Юнга в тонких приповерхностных слоях карбида кремния со стороны Si-и C-граней //Письма в ЖТФ. – 2020. – Т. 46. – №. 15. – С. 36-38; 12) Grashchenko A. S. et al. Nanoindentation of AlN, GaN, and AlGaIn films grown by HVPE on SiC/Si hybrid substrates //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing. – 2021. – Т. 1954. – №. 1. – С. 012009.