

# MAKRO A MIKRONAPÄTIA V POLYKRYŠTALICKÝCH TENKÝCH VRSTVÁCH Si NANESENÝCH NA KERAMICKÉ PODLOŽKY

## LATTICE AND MICRO-STRAINS IN POLYCRYSTALLINE SILICON FILMS DEPOSITED ON CERAMIC SUBSTRATES

Quido Jackuliak <sup>(1)</sup>, Pavol Šutta <sup>(2)</sup>

(1) Katedra fyziky, Elektrotechnická fakulta, Žilinská univerzita, 010 26 Žilina

(2) Katedra fyziky, Fakulta logistiky, Vojenská akadémia, 031 19 Liptovský Mikuláš

**Abstrakt** Röntgenoštruktúrnou analýzou bolo zistene, že tenké vrstvy Si sú polykryštalické a majú výraznú textúru. Tenké vrstvy Si nanesené na SiAlON majú prednostnú orientáciu v smere [110] kolmom na rovinu podložky. Tenké vrstvy Si nanesené na mullite a oxidu hlinitom v smere [111]. Rozmery oblastí koherentného rozptylu sa pohybujú od niekoľko sto nanometrov u vzoriek nanesených na oxid hlinitý do niekoľko mikrometrov u tenkých vrstiev nanesených na mullit. Pri podložke SiAlON, tieto rozmery sú v tom istom rozsahu a závisia od teploty nanášania ako aj od orientácie. Makroskopické napäťia v tenkých vrstvách nanesených na SiAlOn-e sú ľahové a znižujú sa s rastom teploty nanášania, zatiaľ čo v tenkých vrstvách Si nanesených na mullite a oxidu hlinitom sú napäťia tlakové. Vrstevnaté chyby boli zistené len u tenkej vrstvy nanesenej na oxid hlinitý v smere rastu [111] a ich pravdepodobnosť sa rovnala 0,010.

**Summary** X-ray diffraction analysis indicated that the all silicon films are polycrystalline. The preferred orientation of silicon films deposited on SiAlON is almost in [110] direction perpendicular to substrate, whereas the preferred orientation of the silicon films deposited on mullite and alumina is in [111] direction. The crystallite sizes reach from several hundreds of nanometers in Si films on alumina to several micrometers in Si films on mullite. The crystallite sizes SiAlON in Si films on depending on deposition temperature and crystallographic orientation. The tensile lattice stress decreasing with increasing deposition temperature was observed in Si films on SiAlON, whereas the compressive lattice stress was observed in Si films deposited on mullite and alumina substrates. The probability of stacking faults of 0,010 was observed only in direction [111] in Si film on alumina deposited at 1100°C.

### 1. ÚVOD

Polykryštalické kremíkové tenké vrstvy sa javia ako vhodný materiál pre výrobu relatívne lacných fotoelektrických prvkov. Ale aby bolo možné vyrábať tenké vrstvy kremíku v požadovanej vysokej kvalite, je treba zvoliť a dokonale zvládnut' zodpovedajúcu technológiu prípravy týchto tenkých vrstiev. Z tohto dôvodu bolo potrebné preskúmať či v súčasnosti bežné keramické materiály, ako sú oxid hlinitý, mullit a SiAlON sú vhodné pre nanášanie na nich tenkých vrstiev Si.

Cieľom tejto práce bolo pomocou röntgenografickej analýzy skúmať mikroštruktúru a napäťový stav tenkých vrstiev Si nanesených na rôznych keramických podložkách, pretože röntgenoštruktúrne metódy sú vhodné pre skúmanie štruktúry tenkých vrstiev. V prípade tenkých vrstiev nám umožňujú zistiť prednostný rast – textúru vzorky, prítomnosť porúch rastu ako sú vrstevnaté chyby a dvočatenie, veľkosť makronapäťí vo vzorke ako aj jej subštruktúru – veľkosť oblastí koherentného rozptylu a veľkosť mikronapäťí. Znalosť mikroštruktúry tenkých vrstiev potom umožňuje lepšie interpretovať iné fyzikálne vlastnosti namerané na tých istých vzorkách.

### 2. TEÓRIA

Pri skúmaní tenkých vrstiev pomocou difraktometra s usporiadáním Brag-Brentano je možné získať informáciu tak z intenzity jednotlivých reflexov ako aj z ich polohy a profilu.

V prípade, že sa prejaví vplyv podložky na epitaxiálny rast kryštálikov tenkej vrstvy, budeme pozorovať rastovú textúru, ktorá sa prejaví tým, že intenzity difrakčných čiar od jednotlivých difrakčných rovín budú iné oproti intenzitám, ktoré by zodpovedali dokonale neusporiadaným kryštálikom v polykryštale. Mierou textúry môže slúžiť Harrisov texturný index.

$$T_i = \frac{\frac{T_i}{R_i}}{\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \frac{I_j}{R_j}}, \quad (1)$$

kde  $n$  je počet jednotlivých reflexií (vyššie rády sa nezapočítavajú),  $I_i$  je nameraná intenzita od roviny  $R_i$ ,  $k_i$ ,  $T_i$  a  $R_i$  je zodpovedajúca hodnota intenzity pre vzorku tej istej látky s dokonale neusporiadanou orientáciou. Ak pre niektorú rovinu  $R_i$   $k_i$   $I_i$  je  $T_i > 1$ , hovorí to o tom, že došlo k prednostnej orientácii týchto rovín paralelne voči povrchu vzorky.

Na polohu difrakčných čiar u čistých prvkov budú mať vplyv predovšetkým makroskopické napäťia a vrstevnaté chyby. Podľa Višňakova [1] v takomto prípade môžeme parameter mriežky  $a$  vyjadriť nasledovne:

$$a_{hkl} = a_0 + s_1 \sigma a_0 + G \alpha a_0 + mf(\theta), \quad (2)$$

kde  $a_0$  je parameter mriežky bez zvyškových napäťí a vrstevnatých chýb,  $s_1$  – elastická konštantă, ktorá môže závisieť od indexov  $h$ ,  $k$ ,  $l$ ,  $\sigma$  – zvyškové napätie,  $G$  – faktor posunu difrakčných čiar v dôsledku prítomnosti

vrstevnatých chýb, ktorý závisí od indexov  $h, k, l$  a  $m$  – sklon funkcie  $f(\theta)$ . Funkcia  $f(\theta)$  vyjadruje závislosť parametra mriežky od difrakčného uhla. Najvhodnejšie je brať túto podľa [2] v tvare:

$$f(\theta) = \frac{1}{2} \left( \frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right), \quad (3)$$

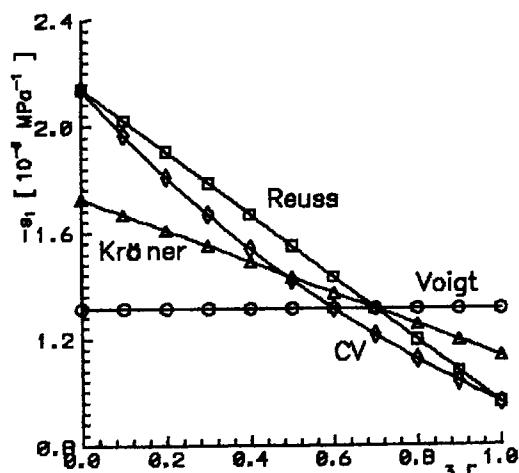
ako to navrhli Nelson a Reghley.

Pre kompaktné polykryštalické vzorky sa bežne doporučuje elastickú konštantu  $s_1$  brať podľa [3]

$$s_1 = k^R s_1^R + k^V s_1^V, \quad (4)$$

kde

$$k^R + k^V = 1. \quad (5)$$



Obr.1 Závislosť elastickej konštanty  $s_1$  od orientácie pre polykryštalický kremík.

Fig.1:  $-s_1$  of Si versus orientation.

Wern a kol. [4] navrhli použiť pre výpočet elastických konštant  $s_1$  a  $1/2 s_2$  obmedzený (Constraint) Voigtov model, skrátene CV model. Súhlasne tomuto CV modelu elastická konštantu  $s_1$  pre Si sa dá vypočítať z elastických konštant monokryštala Si.

$$s_1^{CV} = \frac{\Gamma S^* - 2s_{12}s_{44}}{3\Gamma(2s_{44} + s_{12} - s_{11}) - 2s_{44}}, \quad (6)$$

kde

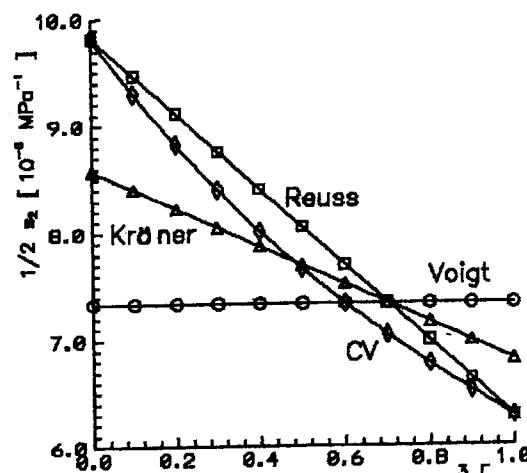
$$S^* = 4s_{12}s_{44} + 2s_{11}s_{44} + 2(s_{12})^2 - s_{11}s_{12} - s_{11}^2 \text{ a} \\ \Gamma = \frac{h^2 k^2 + h^2 l^2 + k^2 l^2}{(h^2 + k^2 + l^2)} \quad (7)$$

je faktor orientácie. Podobne pre elastickú konštantu  $1/2s_2$  dostaneme

$$\left( \frac{1}{2} s_2 \right) = \frac{2(s_{12} - s_{11})s_{44}}{3\Gamma(2s_{44} + s_{12} - s_{11}) - 2s_{44}}. \quad (8)$$

Na základe elastických konštant pre monokryštál Si [5] sme vypočítali  $s_1^{CV}, s_1^R, s_1^V, s_1^K$  ako aj zodpovedajúce elastické konštanty  $1/2s_2$  ako funkcie  $3\Gamma$ , kde horný index K znamená, že rovnica (5) sa berie podľa Krönera. Výsledky sú znázornené na obr.1 a 2. Analýza závislosti parametra mriežky  $a$  od  $f(\theta)$  umožní

rozhodnúť, ktoré elastické konštanty budú použité pre výpočet zvyškových napätií.



Obr.2. Závislosť elastickej konštanty  $1/2s_2$  od orientácie pre polykryštalický kremík.

Fig.2:  $1/2s_2$  of Si versus orientation.

Pretože G faktor neboli v práci [1] vypočítaný pre všetky nami použité roviny  $h, k, l$ , dopočítali sme ho pre chýbajúce roviny podľa vzorca

$$\frac{1}{D_{eff}} = \frac{1}{D} + \frac{1}{u+b} \sum_{u+b} \frac{\cos \phi}{\omega} + \frac{1,5\alpha + \beta}{ah_0(u+b)} \sum_b |L_0|, \quad (9)$$

kde  $b$  je počet rovín  $h, k, l$ , ktoré sa posúvajú v dôsledku vrstevnatých chýb,  $u$  – počet rovín  $h, k, l$ , ktoré sa neposúvajú v dôsledku prítomnosti vrstevnatých chýb a  $(u+b)$  je faktor četnosti pre roviny  $h, k, l$ . V tabuľke 1 sú uvedené hodnoty G faktora.

Tabuľka 1. Hodnoty G faktora pre kryštalické vrstevnaté chýby v rovine (111) pre plošne centrovany kubickú mriežku.

Tab.1. The value of G factor for fcc cubic crystals with stacking faults in (111) plane.

$h \ k \ l$	$G_{hkl}$
111	-0,035
220	-0,035
311	+0,013
331	-0,007
422	0,0
531	0,008

Mikronapäťia a rozmery oblasti koherentného rozptylu je možné získať pomocou profilovej analýzy. V prípade, že rozšírenie difrakčných čiar je spôsobené len mikrodeformáciami a malými rozmermi oblastí koherentného rozptylu bude mať fyzikálne rozšírenie Foigtova profil [6]. Tento je konvolúciou Gaussovoho a Cauchyho rozdelenia, preto je možné v prípade, že nie sú k dispozícii aspoň dva rády od jednej roviny použiť aproximáčny metódou pre stanovenie Gaussovej a Cauchyho zložiek fyzikálneho rozšírenia, napríklad metódou nepriamej dekonvolúcie [7]. Táto metóda umožní zistit najlepšie priblženie k fyzikálnemu rozšíreniu a tým aj výpočet  $2w$  šírky čiary (šírka čiary

v polovičnej výške jej intenzity) a pomocou tabuľkových integrálov aj integrálne šírky  $2\beta$  jednotlivých zložiek. Z týchto je možné vypočítať hľadané hodnoty mikrodeformácií a rozmerov oblastí konkrétneho rozptylu.

V prípade prítomnosti vrstevnatých chýb môžeme vypočítať len efektívny rozmer oblastí konkrétneho rozptylu  $D_{ef}$  ako to je uvedené v [1], kde  $D$  je skutočný rozmer oblasti konkrétneho rozptylu,  $\sin \phi = L_0 |B_3| d_{hkl}$ ,  $L_0 = h + k + l$ ,

$B_3$  je jednotkový vektor v recipročnom priestore  $|B_3| = \frac{1}{3d_1}$ ,  $a$  – parameter mriežky,  $u + b$  – faktor četnosti pre roviny ( $h k l$ ),  $b$  – počet rovín zo súboru ( $h k l$ ), ktoré sa rozširujú v dôsledku vrstevnatých chýb,  $u$  – počet rovín zo súboru ( $h k l$ ), ktoré sa nerozširujú v dôsledku vrstevnatých chýb,  $h_0 = \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$ ,  $\alpha$  – pravdepodobnosť vrstevnatých chýb,  $\beta$  – pravdepodobnosť výskytu dvojčatenia a  $\omega$  – šírka vrstevnej chyby.

### 3. EXPERIMENT

Tenké vrstvy kremíku hrúbky 10  $\mu\text{m}$  boli nanesené na keramické podložky SiAlON-u, oxidu hlinitého a mullitu CVD metódou pri rôznych teplotách od  $900^\circ\text{C}$  po  $1100^\circ\text{C}$  [8]. Keramické podložky boli v polykryštalickom stave, ako potvrdila röntgenoštruktúrna analýza. Predbežná röntgenoštruktúrna analýza ukázala, že všetky tenké vrstvy Si boli tiež polykryštalické. Pre stanovenie makroskopických napäť v tenkých vrstvach ako aj mikronapäť a veľkosť oblastí koherentného rozptylu sme použili röntgenoštruktúrne metódy. Röntgenová analýza bola urobená na difraktometri URD-6 s použitím Bragg-Brentanovho usporiadania goniometra. Použili sme  $\text{Cu}_{\text{K}\alpha}$  žiarenie.

Meranie intenzity jednotlivých difrakčných čiar sa robilo s konštantným krokom 0,02 stupňov v stupniči  $2\theta$  s dobu načítania 20 sekúnd v každom bode. Namerané hodnoty boli upravené pomocou vyhľadzovania chvostov čiar a korekciami na pozadie.

Pre stanovenie makroskopických napäť vo vzorkách je nutné čo najpresnejšie stanoviť polohy jednotlivých difrakčných čiar. Preto na zistenie polohy

$\alpha_1$  zložky röntgenového žiarenia sme použili aproximačnú metódu. Osvedčila sa nám metóda aproximačie difrakčnej čiary asymetrickým profilom Pearson VII [9].

Pre profilovú analýzu sme použili pre zistenie prístrojových čiar práškový  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  etalón z NIST-u. Experimentálne namerané difrakčné čiary boli upravené podobne ako difrakčné čiary od vzoriek a bola zistená uhlová závislosť  $2w$  a  $2\beta$  širok difrakčných čiar [9]. Ukázalo sa, že nie u všetkých vzoriek je možné použiť integrálnu metódu napr. [9] stanovenia širok  $2w$  a  $2\beta$  difrakčných čiar. Príčina je v prítomnosti difúzneho rozptylu od silne neusporiadanej medzivrstvy Si. V prípade použitia integrálnej metódy sa tento difúzny rozptyl premietne pri aproximácii ako chvosty difrakčnej čiary, čo vedie k nesprávnemu stanoveniu  $2w$  a  $2\beta$  širok čiar, napr. šírka difrakčnej čiary pri menšom uhle  $2\theta$  je väčšia ako pri väčšomuhle  $2\theta$ . Preto sme použili metódu nepriamej dekonvolúcie [7], pretože vo väčšine vzoriek nie sú prítomné vrstevnaté chyby a teda v dôsledku malých rozmerov oblastí koherentného rozptylu a mikrodeformácií bude mať fyzikálne rozšírenie difrakčnej čiary Foigtov profil.

V prípade tenkej vrstvy nanesenej na oxid hlinitý, kde bola zistená prítomnosť vrstevnatých chýb, boli stanovené mikronapäťia a rozmery oblastí koherentného rozptylu aproximačnou metódou s použitím asymetrického profilu Pearson VII. V tomto prípade sme stanovili rozmery  $D_{ef}$  ako je zrejmé zo vzorca (9).

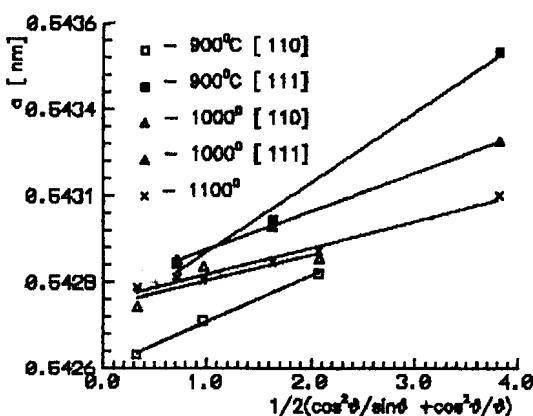
### 4. VÝSLEDKY A DISKUSIA

Tenké vrstvy Si na použitých keramických podložkách vykazujú textúru. Veľkosť textúry je možné posúdiť z hodnôt Harrisovho textúrného indexu, ktoré sú uvedené v tab.2. Na položkách oxidu hlinitého a mullitu je textúra podľa očakávania v smere [111]. Výraznejšiu textúru sme pozorovali na podložke oxida hlinitého oproti podložke mullitu, pozri tabuľku 2. Textúra na podložke SiAlON-u je v smere [110], silne závisí od teploty a s rastom teploty nanášania klesá.. Pozoruhodné je, že práve podložka SiAlON-u má rovinu s medzirovinnou vzdialenosťou najbližšou k medzirovinej vzdialenosťi Si pre rovinu (111). Zdá sa, že pre vznik textúry je dôležitejšie, ako sú usporiadane atómy v rovine, na ktorej bude tenká vrstva rást', ako zhodnosť medzirovinných vzdialenosťí.

Tabuľka 2. Harrisov textúrny index pre tenké vrstvy Si nanesené na keramických podložkách.

Tab. 2. Harris texture index for silicon films deposited on ceramic substrates

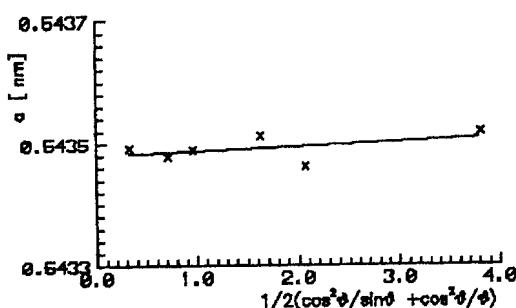
Podložka	Teplota nanášania	Smer textúry	T
Sialon	$900^\circ\text{C}$	[110]	4,63
Sialon	$1000^\circ\text{C}$	[110]	2,28
Sialon	$1100^\circ\text{C}$	[110]	2,02
Alumina	$1100^\circ\text{C}$	[111]	3,20
Mullit	$1100^\circ\text{C}$	[111]	2,08



Obr.3. Závislosť parametra mriežky Si naneseného na SiAlON-e v závislosti od funkcie  $f(\theta)$ .

Fig.3: Lattice parameter Si deposited on SiAlON as a function of  $f(\theta)$ .

Pri skúmaní posunu polohy difrakčných čiar Si v závislosti na podložke a teplote nanášania sme pozorovali, že vo väčšine prípadov je tento posun lineárny v závislosti od funkcie  $f(\theta)$  (3), za predpokladu, že máme dve sústavy rastu vrstiev, a to v smeroch [111] a [110]. Vo vzorkach na podložkách SiAlON-u a mullitu pri teplote 1100°C je závislosť posunu čiar od funkcie  $f(\theta)$  lineárna pre všetky merané difrakčné čiary, pozri obr. 3 a 4.



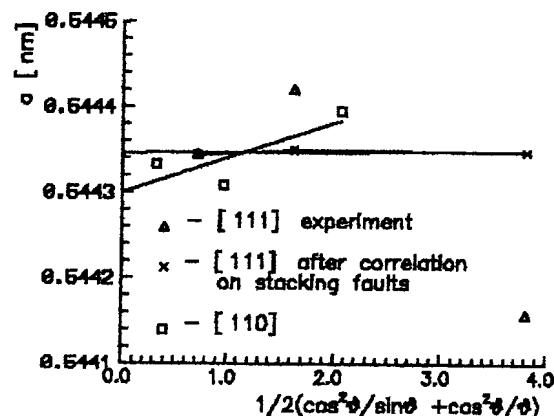
Obr.4. Závislosť parametra mriežky Si naneseného na mullite v závislosti od funkcie  $f(\theta)$ .

Fig.4: Lattice parameter Si deposited on mullite as a function of  $f(\theta)$ .

Znamená to, že v týchto vrstvách deformácie kryštálikov nezávisia od orientácie a nie sú prítomné vrstevnaté chyby. Parametre m vo vzorci (2) pre tieto závislosti sú uvedené v tabuľke 3. Na podložke SiAlON-u pri nižších teplotach 900°C a 1000°C dochádza k spomínanému rozdvojeniu do dvoch sústav rastu, ale pre predpokladané smery rastu [111] a [110] je závislosť od funkcie  $f(\theta)$  lineárna, pozri obr. 3.

Z tohto vyplýva, že ani v týchto vrstvách neboli pozorované vrstevnaté chyby.

Najzložitejšia závislosť parametra mriežky od  $f(\theta)$  je u vzorky Si nanesenej na podložku oxidu hlinitého, pozri obr.5. Posun difrakčnej čiary od rovine (111) je veľmi výrazný. Pre smer rastu [111] sme urobili metódou pokus – omyl korekciu na vrstevnaté chyby v rovine (111). Dobrú zhodu s experimentálnymi údajmi sme dosiahli pre pravdepodobnosť vrstevnatých chýb 0,010, pozri obr. 5. Pre smer rastu [110] boli posuny difrakčných čiar také, že ani metódou pokus – omyl nebolo možné preukázať prítomnosť vrstevnatých chýb v rovine (111) a na druhej strane vylepšiť lineárnu závislosť parametra mriežky od funkcie  $f(\theta)$ .



Obr.5. Závislosť parametra mriežky Si naneseného na oxidu hlinitom v závislosti od funkcie  $f(\theta)$ .

Fig.5: Lattice parameter Si deposited on alumina as a function of  $f(\theta)$ .

Pre výpočet makroskopických napäťí sme za nedeformovanú mriežkovú konštantu uvažovali tabuľkovú hodnotu pre čistý Si. Ako bude vidieť z nižšie uvedeného, polohy difrakčných čiar Si sú od dostatočne veľkých kryštálikov a len s veľmi malými mikrodeformáciami. Silne neusporiadaná medzivrstva Si vo vzorke na podložke SiAlON-u pri teplote 900°C spôsobuje difúzný rozptyl [10], ale neovplyvňuje polohu difrakčnej čiary. Preto môžeme predpokladať, že u nami skúmaných vzoriek je posun difrakčných čiar vyvolaný len makronapäťami a vrstevnatými chybami. Pre presné stanovenie polohy vrcholu difrakčnej čiary sa nám osvedčila metóda popísaná v [10]. Výsledky nameraných makronapäťí pre jednotlivé vzorky sú uvedené v tab.3. Elastickú konštantu  $s_1$  sme brali vypočítanú podľa CV modelu okrem vzoriek na podložkách SiAlON-u a mullitu pri teplote nanášania 1100°C, kde sme použili  $s_1$  vypočítanú podľa modelu Foigta. Ukázalo sa, že na podložke SiAlON-u sú napäcia v tenkej vrstve Si ďahové a s rastúcou teplotou klesajú. Ukázalo sa, že ak použijeme model rozdelenia napäťí podľa Werna a kol [4] dostaneme rovnaké napäcia v smere rastu [110] a [111] pre tenkú vrstvu Si nanesenú na podložku

Tabuľka 3. Makroskopické napäťia v tenkých vrstvách Si nanesených na keramických podložkách

Tab.3. Lattice strains in polycrystalline silicon films deposited on ceramic substrates

Podložka	Teplota nanášania	Smer textúry	$a$ [nm]	$m$	$\sigma_1 + \sigma_2$
Sialon	900 °C	[110]	0,542603	+ 0,00013	700 MPa
Sialon	900 °C	[111]	0,542739	+ 0,00020	570 MPa
Sialon	1000 °C	[110]	0,542799	+ 0,000075	400 MPa
Sialon	1000 °C	[111]	0,542831	+ 0,00011	400 MPa
Sialon	1100 °C		0,542806	+0,000077	340 MPa*
Alumina	1100 °C	[110]	0,544300	-0,000046	-2,0 GPa
Alumina	1100 °C	[111]	0,544346	-0,000007	-2,4 GPa
Mullitt	1100 °C		0,543481	+0,000007	-600 MPa*

Veličiny označené \* sú vypočítané podľa Voigtovho modelu, nakoľko deformácie vo všetkých meraných kryštalografických rovinách boli rovnaké.

Tabuľka 4. Mikrodeformácie a rozmery oblastí koherentného rozptylu v tenkej vrstve Si nanesenej na SiAlON v závislosti od kryštalografickej roviny

Tab.4 Microstrains and crystallite size in polycrystalline silicon films deposited on SiAlON as function of crystallographic plane.

h k l	Teplota nanášania					
	900°C		1000°C		1100°C	
	$<\epsilon^2> \times 10^{-8}$	$<D> [\text{nm}]$	$<\epsilon^2> \times 10^{-8}$	$<D> [\text{nm}]$	$<\epsilon^2> \times 10^{-8}$	$<D> [\text{nm}]$
111	19,3	66	11,7	2100	11,2	nad 10000
220	41	215	0,7	530	0,4	nad 10000
311	359	94	92	160	3,7	nad 10000
331	31,4	58	6,4	157	2,0	7000
422	0,7	40	2,0	73	7,7	2780

Tabuľka 5. Mikrodeformácie a rozmery oblastí koherentného rozptylu v tenkej vrstve Si nanesenej na mullitt a korund pri teplote 1100°C v závislosti od kryštalografickej roviny.

Tab.5 Microstrains and crystallite size in polycrystalline silicon films deposited on mullit and alumina as function of crystallographic plane

Podložka	mullitt		Alumina		
	h k l	$<\epsilon^2> \times 10^{-8}$	$<D> [\text{nm}]$	$<\epsilon^2> \times 10^{-8}$	$<D> [\text{nm}]$
111	3,1	524	10,8	340*	
220	3,5	4010	4	200	
311	3,2	320	116	255*	
331	0,5	340	2,5	93	
422	3,0	280	2,4	84*	

Poznámka: Veličiny označené \* sú hodnoty  $D_{\text{ef}}$ , pretože v týchto rovinách sú prítomné vrstevnaté chyby.

hové a s rastúcou teplotou klesajú. Ukázalo sa, že ak použijeme model rozdelenia napäťí podľa Werna a kol [4], dostaneme rovnaké napäťia v smere rastu [110] a [111] pre tenkú vrstvu Si nanesenú na podložku SiAlOn-u pri teplote nanášania 1000°C. Pri použití iných modelov rozdelenia napäťí sú hodnoty zistených napäťí rôzne. Na podložke mullitu sú napäťia čo do veľkosti rádové ako u podložky SiAlON-u, ale sú tlakové. Na podložke oxidu hlinitého sú v tenkých vrstvach Si veľmi vysoké tlakové napäťia rádové GPa. Zistili sme, že makronapäťia sú vyššie v smere prednostného rastu kryštálikov

Pretože pre kryštály Si je dominantný smer rastu [111], zistili sme podľa očakávania, že najmenšie rozmery oblastí koherentného rozptylu a najväčšie mikrodeformácie sú u tenkej vrstvy Si nanesenej na SiAlOn-e pri teplote 900°C, ktorá má výraznú textúru v

smere [110]. Naopak u tenkej vrstvy Si nanesenej na podložku SiAlON pri teplote 1100°C rozmer kryštálikov v smere kolmom na podložku je prakticky rovný hrúbke samotnej tenkej vrstvy. Mikrodeformácie sú veľmi malé, ale u niektorých tenkých vrstiev, ako u tenkých vrstiev Si na SiAlON-e pri teplotách 900°C a 1000°C a tiež pri podložke oxidu hlinitého sme pozorovali ich výrazný nárast v rovinách {311}. Zistené hodnoty mikrodeformácií a rozmerov oblastí koherentného rozptylu sú uvedené v tab.4 a tab.5

## 5. ZÁVER

Polykryštalické tenké vrstvy Si nanesené na keramických podložkách SiAlON-u, mullitu a oxidu hlinitom sa vyznačujú taxtúrou, ktorá nie vždy zodpovedá misfitu. Na podložke SiAlON-u je prednostný smer rastu kryštálov [110], hoci práve u

tejto podložky je misfit roviny [111] Si najmenší. Na podložkách mullitu a oxidu hlinitého je predostný smer rastu [111].

Makronapäťia v tenkých vrstvách Si na podložkách SiAlON-u a oxidu hlinitého sú rôzne v rôznych smeroch rastu. Pričom napäťia v tenkých vrstvách Si na podložkách SiAlON-u sú ľahové a na podložkách oxidu hlinitého a mullitu sú tlakové. Väčšie napäťia sme pozorovali v rovinách zodpovedajúcich predostnému smeru rastu. V tenkých vrstvách Si na podložkách SiAlON-u napäťia závisia od teploty a s rastom teploty klesajú.

Vrstevnaté chyby sme pozorovali len u tenkej vrstvy nanesenej na podložku oxidu hlinitého a to v smere predostného rastu [111], kde zistená hodnota pravdepodobnosti v rovinách (111) bola 0,010.

Mikronapäťia vo všetkých tenkých vrstvách Si sú veľmi malé. Určitú anomáliu sme pozorovali v tenkej vrstve Si nanesenej na podložku SiAlON-u pri teplote nanášania 900°C, kde sú mikronapäťia vyššie.

Rozmery oblastí koherentného rozptylu sú relativne vysoké. V tenkých vrstvách, nanesených na podložkách mullitu a SiAlON-u pri teplote nanášania 1100°C, jednotlivé kryštáliky v smere rastu majú rozmer hrúbky nanesenej vrstvy.

#### **LITERATÚRA:**

- [1] Višňakov, Ja.D.: Defekty upakovki kristalličes koj strukture. Metallurgia, Moskva, 1970
- [2] Rentgenografia (redaktor Kacnel'son A.A.) Izdateľstvo Moskovskogo universiteta, Moskva, 1986.
- [3] Kraus I, Trofimov V.V.: Rentgenová tenzometrie, Academia, Praha, 1988
- [4] Wern H., Johannes R. and Walz H.: Phys.stat.sol. (6) 206, 545, (1998)
- [5] Kelli A., Grovs G.: Kristallografia i defekty v kristallach, Mir, Moskva, 1974
- [6] Balzar D. and Ledbetter H.: Appl. Cryst. 26, (1993) 97 – 103
- [7] Jackuliak Q., Šutta P.: A Method of Indirect Deconvolution for Determination of the Physical Profile of Diffraction Line, in Elektro 2001 section: Fundamental Phenomena and Principles for Application in Electrical Engineering, May 22 – 23, 2001, Žilina
- [8] J.M.M. van Zutphen, P. Šutta, F.D. Tichelaar, A. von Keitz, M. Zeman, J.W. Metselaar, Journal of Crystal Growth 223 (2001) pp. 332-340.
- [9] Jackuliak Q., Šutta P.: Method of Calculation of  $K\alpha 1$  and  $K\alpha 2$  Components of Instrumental Diffraction Line Considering Different Components Asymmetry, In Elektro '99 section: Fundamental Phenomena and Principles for Application in Electrical Engineering, May 25 – 26, 1999, Žilina