

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова
Сибирского отделения Российской академии наук

На правах рукописи



Малин Тимур Валерьевич

**Эпитаксиальные слои GaN на кремниевых
подложках для AlGaN/GaN гетероструктур с
высокой подвижностью электронов**

1.3.11 – физика полупроводников

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата технических наук

Научный руководитель:

кандидат физико-математических наук,

старший научный сотрудник ИФП СО РАН

Мансуров Владимир Геннадиевич

Новосибирск – 2024

Оглавление

Введение.....	3
Глава 1 А ₃ -нитридные гетероструктуры для транзисторов с высокой подвижностью электронов	12
1.1 Нитрид галлия и транзисторы с высокой подвижностью электронов	12
1.2 Полярность и поляризация А ₃ -нитридов, природа формирования 2DEG	13
1.3 Дрейфовая скорость электронов в GaN	23
1.4 Типы гетероструктур, используемые при изготовлении GaN-HEMT	25
1.5 Технологические задачи требующие решения при росте AlGaN/GaN ГЭС на кремниевых подложках	30
Глава 2 Аммиачная молекулярно-лучевая эпитаксия А ₃ -нитридов	37
2.1 Особенности установки аммиачной молекулярно-лучевой эпитаксии Riber Compact-21N	37
2.2 Контроль температуры на поверхности подложек и измерение скорости роста А ₃ -нитридных слоёв.....	45
2.3 Характеристики оборудования используемого для характеристики А ₃ -нитридных ГЭС физическими методами исследования твёрдого тела.....	52
Глава 3 Рост слоёв GaN на кремниевых подложках для приборных применений методом аммиачной молекулярно-лучевой эпитаксии.....	57
3.1 Морфология поверхности слоев GaN выращиваемых методом аммиачной МВЕ	57
3.2 Подавление растрескивания слоёв GaN выращиваемых на кремниевых подложках	59
3.3 Влияние нитридации кремниевой подложки на остаточные напряжения в зародышевых слоях AlN-на-Si	72
3.4 Влияние ростовых условий GaN на токи утечки в буферных слоях GaN-на-Si	85
Глава 4 Сравнение электрофизических параметров ГЭС с 2DEG, выращенных на подложках кремния и сапфира	93
Заключение	104
Список основных обозначений и сокращений.....	105
Список литературы	107
Публикации по теме диссертации	122

Введение

В настоящее время наблюдается бурное развитие устройств на основе нитрида галлия – широкозонного полупроводникового материала современной микроэлектроники. Нитрид галлиевые радиоприборы стали все шире внедряться не только в стратегическую СВЧ электронику, но и телекоммуникационную инфраструктуру благодаря высокой плотности мощности и меньшему, по сравнению с кремниевыми и GaAs решениями, форм-фактору. Гетероэпитаксиальные GaN структуры (ГЭС) с двумерным электронным газом (2DEG) на подложках Si особенно актуальны в связи с возможностью интеграции технологии эпитаксии A_3 -нитридов в развитую планарную кремниевую технологию. Кроме того, довольно высокая теплопроводность, высокое кристаллическое качество и коммерческая доступность пластин большого диаметра делают кремний привлекательным подложечным материалом для роста ГЭС на основе нитридов галлия и алюминия (A_3 -нитридов) для создания в конечных устройствах.

Актуальность темы исследования и степень ее разработанности

Полевой транзистор с высокой подвижностью электронов в канале (HEMT) на основе A_3 -нитридных ГЭС с 2DEG уже является общепризнанным лидером в области разработки базовых элементов для нового поколения приборов СВЧ и силовой электроники. Преимущества транзисторов на основе A_3 -нитридных структур основываются на возможности получения более высокой проводимости канала, по сравнению со структурами на основе кремния и классических A_3B_5 (AlGaAs/GaAs) ГЭС, значительно большей напряженности пробойного поля и большей теплопроводности, а также, меньшей чувствительности к температуре и радиации, что обеспечивает возможность работы приборов в экстремальных условиях [1, 2].

Развитие GaN силовой электроники приводит к конкуренции транзисторов на основе GaN с кремниевыми биполярными транзисторами с изолированным затвором (IGBT) и транзисторами на основе карбида кремния

(SiC). Применение подложек SiC для роста GaN гетероструктур, используемых при создании транзисторов, ограничивается значительно более высокой ценой на подложки SiC по сравнению с подложками лейкосапфира (Al_2O_3) и кремния (Si), последние из которых являются фундаментальным материалом современной электроники. Основными подложками для роста GaN гетероструктур для силовой электроники на данный момент остаются подложки Si(111) [3, 4]. Обеспечение достаточного теплоотвода от кремниевой подложки позволяет использовать СВЧ транзисторы на основе нитрид галлиевых ГЭС, выращенных на кремниевых подложках, вплоть до 18ГГц, что стимулирует исследования направленные на развитие технологии роста GaN-на-Si [5, 6].

Существенной технологической проблемой при росте A_3 -нитридных слоёв на подложках Si (111) является растрескивание эпитаксиальных пленок в процессе постростового охлаждения. Природа данной проблемы непосредственно связана с несоответствием параметров кристаллических решеток Si(111) и A_3 -нитридов ($\sim 18\%$), а также с различием коэффициентов термического расширения (КТР) ($\sim 54\%$) [7], и, как следствие, приводящих к образованию в эпитаксиальном слое дефектов высокой плотности различной природы включая образование трещин [8,9]. Механизм образования трещин в слоях GaN-на-Si хорошо проиллюстрирован в работе [10]. Поэтому, при выборе конструкции буферного слоя при росте A_3 -нитридных структур на подложках Si(111) требуется уделять особое внимание решению данной проблемы.

Одним из ключевых параметров, определяющих предельные характеристики СВЧ транзисторов, является подвижность электронов в 2DEG. Исследованию механизмов рассеяния носителей заряда в AlGaIn/GaN гетероструктурах посвящено множество работ, например [11, 12]. Теоретический предел, ограничивающий подвижность носителей заряда в 2DEG, связывают с рассеянием электронов на оптических фононах. Помимо этого, важную роль в рассеянии играют такие механизмы, как рассеяние на

шероховатостях гетерограницы, сплавное рассеяние, вызванное флуктуациями состава AlGaN, кулоновское рассеяние на остаточных донорах и рассеяние электронов в деформационных полях вокруг дислокаций [13]. Таким образом, получение гладкой морфологии активного слоя GaN и формирование резкой AlGaN/GaN гетерограницы, в совокупности со снижением плотности дислокаций в активном слое GaN – важные шаги на пути к достижению предельных электрофизических параметров ГЭС для НЕМТ.

Не менее важной задачей при росте гетероструктур для транзисторов с высокой подвижностью электронов на основе соединений A₃-нитридов является получение буферного слоя GaN с высокими значениями пробивного напряжения и низкими токами утечки. Как известно, слои GaN зачастую имеют *n*-тип проводимости из-за непреднамеренного легирования кислородом из остаточной атмосферы ростовой камеры в процессе роста слоёв [14]. При этом, в ряде работ сообщается о возможности управления фоновым легированием углеродом [15] и кислородом [16] путём изменения ростовых условий, что открывает возможность управлять проводимостью слоёв GaN, изменяя их ростовые условия.

Цель и задачи диссертационной работы:

Цель диссертационной работы заключалась в разработке физических основ аммиачной молекулярно-лучевой эпитаксии свободных от трещин слоёв GaN-на-Si для транзисторов с высокой подвижностью электронов, включающую в себя технологию роста структурно совершенного активного слоя GaN с гладкой морфологией поверхности.

Для достижения поставленной цели в ходе работы решались следующие основные задачи:

- 1) Разработка метода прецизионного контроля температуры на поверхности выращиваемых методом NH₃-МВЕ слоёв A₃-нитридов;
- 2) Отработка технологического процесса контролируемой нитридации кремниевой подложки;
- 4) Создание технологии роста свободных от трещин слоёв GaN-на-Si;

5) Поиск ростовых условий слоёв GaN с гладкой морфологией поверхности, пригодной для создания транзисторов с высокой подвижностью электронов.

Научная новизна полученных результатов:

1. Продемонстрировано, что процесс нитридации кремниевой подложки играет в подавлении процесса образования трещин в слоях GaN, выращиваемых на кремнии, не менее важную роль, чем выбор конструкции буферного слоя.

2. Впервые приведены экспериментальные доказательства, образования аморфной фазы нитрида кремния на гетерогранице AlN/Si при высокотемпературной ($> 800\text{ }^{\circ}\text{C}$) нитридации кремниевой подложки одновременно с образованием SiN-(8×8);

3. Определено влияние аморфных островков нитрида кремния на гетерогранице AlN/Si, образующихся при нитридации кремниевой подложки и последующей эпитаксии слоя AlN, на упругие напряжения в слоях AlN-на-Si;

4. Установлено, что вне зависимости от остаточных упругих напряжений в эпитаксиальных слоях GaN морфология поверхности слоев определяется исключительно ростовыми условиями.

5. Произведена численная оценка влияния материала подложки на плотность прорастающих дислокаций в слоях GaN, благодаря сравнению плотности дислокаций в слоях GaN, выращенных на кремниевых и сапфировых подложках с применением одинаковых конструкций буферных слоёв и одинаковых условий роста (плотность дислокаций для подложки кремния составила $\sim 10^9\text{ см}^{-2}$, а для подложки сапфира $\sim 10^8\text{ см}^{-2}$).

6. Проведено сравнение параметров 2DEG в AlGaN/GaN ГЭС, выращенных методом NH₃-МВЕ на подложках кремния и сапфира с использованием одинаковых конструкций буферных слоёв ГЭС и условий

роста (подвижность электронов 2DEG для сапфировой подложки составила $\sim 1600 \text{ см}^2/\text{В}\times\text{с}$, для кремниевой подложки $\sim 1200 \text{ см}^2/\text{В}\times\text{с}$).

Практическая значимость работы:

1. Предложен оригинальный способ контроля температуры на поверхности растущей плёнки, основанный на записи и последующей аппроксимации спектров излучения подложки.

2. Создана технология роста свободных от трещин слоёв GaN, включающая в себя контролируруемую низкотемпературную нитридизацию подложек кремния и предложены конструкции буферных слоёв, снижающих растягивающие напряжения в A_3 -нитридных ГЭС.

3. Определены условия роста (температура роста $800 \text{ }^\circ\text{C}$; поток аммиака $200 \text{ норм. см}^3/\text{мин}$) слоёв GaN, выращиваемых методом NH_3 -МВЕ с гладкой морфологией поверхности, удовлетворяющей приборным применениям.

4. Продемонстрирована возможность создания AlGaN/GaN гетероструктур с 2DEG на подложках кремния методом NH_3 -МВЕ.

Объекты и методы исследования:

Объектом исследования являлись эпитаксиальные слои GaN, AlN и ГЭС с 2DEG, выращенные методом аммиачной молекулярно-лучевой эпитаксии (NH_3 -МВЕ) на подложках кремния и сапфира.

Для решения поставленных в работе задач использовались современные экспериментальные методы и теоретические модели. Морфология слоёв и формирование сверхструктур на поверхности выращиваемых плёнок исследовались методами дифракции быстрых электронов на отражение (ДБЭО), атомно-силовой микроскопии (АСМ) и сканирующей туннельной микроскопией (СТМ). Макроскопические дефекты (трещины) на поверхности исследуемых образцов контролировались с помощью оптической микроскопии. Структурное совершенство эпитаксиальных слоёв оценивалось по данным дифракции рентгеновских лучей (ДРЛ) и путём анализа дефектных полос в спектрах фототоллюминесценции (ФЛ). Определение остаточных

напряжений в слоях GaN, выращиваемых на различных подложках осуществлялось с помощью комбинационного рассеяния света (КРС). Исследование границы раздела AlN/Si осуществлялось методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) с применением быстрого преобразования Фурье (FFT). Контроль толщин выращиваемых слоёв ГЭС *in situ* осуществлялся с помощью измерений скорости роста оптическим рефлектометром, *ex situ* проверка толщин буферных слоёв ГЭС выполнялась методами ПЭМ и сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). Оценка концентраций нейтральных доноров в слоях GaN-на-Si, производилась на основе результатов аппроксимации кривых затухания ФЛ теоретической зависимостью. Токи утечки в слоях GaN-на-Si измерялись при помощи анализатора параметров полупроводниковых приборов Agilent B1500A с использованием ручной зондовой станции Cascade M150. Электрофизические параметры 2DEG измерялись методом Ван дер Пау.

Научные положения, выносимые на защиту:

1. Низкотемпературная нитридизация поверхности кремния (111) (~ 700 °С) в сравнении с более высокими температурами нитридизации при фиксированной дозе нитридизации, приводит к уменьшению количества островков аморфного SiN на границе раздела AlN/Si, что обеспечивает снижение растягивающих напряжений в зародышевых слоях AlN-на-Si.

2. Условия нитридизации кремниевых подложек существенно влияют на процесс образования трещин в эпитаксиально выращиваемых слоях GaN-на-Si. Свободные от трещин слои GaN-на-Si, в аммиачной молекулярно-лучевой эпитаксии, возможно получить при совместном применении оптимальной низкотемпературной нитридизации кремния (температура 700 °С; поток аммиака 1 норм. см³/мин; время нитридизации 120 с) и использовании конструкций буферных слоёв, вводящих сжимающие напряжения в выращиваемые слои ГЭС.

3. Для получения гладкой морфологии поверхности (RMS менее 5 нм) слоёв GaN, эпитаксиальный рост необходимо выполнять при

температуре 800 °С в потоке аммиака 200 норм. см³/мин, который характеризуется режимом квазитечения ступеней, закручивающихся вокруг мест выхода прорастающих дислокаций, при этом морфология поверхности слоёв GaN, выращиваемых на различных подложках не зависит от величины остаточных механических напряжений в них.

Достоверность результатов:

Достоверность результатов, представленных в диссертации, обеспечивается использованием современных экспериментальных методов исследования, воспроизводимостью результатов, хорошим согласием экспериментальных данных с теоретическими расчетами, сопоставлением результатов с данными работ других авторов.

Личный вклад автора

Все результаты работы были получены в ходе выполнения государственных заданий «Аммиачная молекулярно-лучевая эпитаксия GaN гетероструктур на подложках кремния для силовых и СВЧ транзисторов» и «Гетероструктуры на основе материалов A₃B₅ для радиофотоники, СВЧ электроники и фотоэлектроники», научно-исследовательской работы «Исследование возможности применения в качестве подложек пластин полированных из кремния монокристаллического, выращенного по методу бестигельной зонной плавки, для изготовления гетероструктур Ga(Al)N методом молекулярно-лучевой эпитаксии», гранта РФФИ «Механизмы образования новой графеноподобной модификации нитрида кремния (g-Si₃N₃) на поверхности Si(111) и возможности ее применения в синтезе силицена». В ходе работы в ИФП СО РАН соискатель модернизировал установку Riber СВЕ/МВЕ-32Р, преобразовав её в установку NH₃-МВЕ, а также произвёл перенос технологии роста нитридных слоёв на введённую им в работу установку NH₃-МВЕ Riber Compact-21. Рост всех исследуемых в рамках диссертации образцов и 99% нитридных образцов, выращенных с 2009 года в

ИФП СО РАН, осуществлялся соискателем. Основные результаты диссертации были получены при непосредственном участии автора.

Апробация работы:

Результаты, полученные в рамках данной работы, были апробированы на всероссийских и международных конференциях: на 10-ой Всероссийской конференции «Нитриды галлия индия и алюминия структуры и приборы»; на 11-ой Всероссийской конференции «Нитриды галлия индия и алюминия структуры и приборы»; на 19-ом Европейском семинаре «EuroMBE19»; на 13-ой Международной научно-практической конференции по физике и технологии наногетероструктурной СВЧ-электроники «МОКЕРОВСКИЕ ЧТЕНИЯ»; на 15-ой Российской конференции по физике полупроводников; на 15-ой Международной научно-практической конференции по физике и технологии наногетероструктурной СВЧ-электроники «МОКЕРОВСКИЕ ЧТЕНИЯ».

Публикации:

Материалы диссертации опубликованы в 12 печатных работах [A1 – A9], из них 6 статей в рецензируемых журналах (входящих в список журналов ВАК, индексируемых в базах РИНЦ, Web of Science и Scopus), 6 тезисов докладов на российских и международных конференциях. Перечень публикаций, отражающих основное содержание диссертационной работы, приведен в конце автореферата.

Структура и объем диссертации:

Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения, списка сокращений и условных обозначений, списка литературы, списка публикаций автора по теме работы. Работа изложена на 124 страницах и содержит 4 таблицы, 47 рисунков, список литературных источников из 119 наименований.

Краткое содержание:

Глава 1 « A_3 -нитридные гетероструктуры для транзисторов с высокой подвижностью электронов» посвящена обзору развития GaN СВЧ и силовой электроники, описанию явления спонтанной поляризации в A_3 -нитридах и

природе формирования 2DEG в A_3 -нитридных гетероструктурах, сравнению различных конструкций гетероструктур с 2DEG и технологическим задачам, требующим решения при выращивании слоёв GaN на кремниевых подложках для приборных применений.

Глава 2 «Аммиачная молекулярно-лучевая эпитаксия A_3 -нитридов» содержит описание конструкций современных установок NH_3 -МВЕ, обзор технических проблем, возникающих при NH_3 -МВЕ и пути их решения, а также включает описание оригинального оптического метода контроля температуры на поверхности растущей плёнки и раздел, посвящённый контролю скорости роста A_3 -нитридов методом оптической рефлектометрии. Помимо описания особенностей метода NH_3 -МВЕ глава содержит раздел, посвящённый описанию используемого оборудования для характеристики ГЭС применяемыми физическими методами исследования твёрдого тела.

Глава 3 «Рост слоёв GaN на кремниевых подложках для приборных применений методом аммиачной молекулярно-лучевой эпитаксии» посвящена отработке технологии роста свободных от трещин слоёв GaN, выращиваемых на кремниевых подложках методом NH_3 -МВЕ, включая исследование границы раздела зародышевого AlN и кремниевой подложки при различных условиях нитридации кремния. Помимо этого, глава включает в себя результаты поисковых ростовых исследований, направленных на получение пригодной для формирования резких гетерограниц морфологии слоёв GaN, выращиваемых методом NH_3 -МВЕ и результаты исследований влияния температуры роста на сопротивление слоёв GaN-на-Si.

Глава 4 «Сравнение электрофизических параметров ГЭС с 2DEG выращенных на подложках кремния и сапфира» содержит описание результатов сравнения структурных свойств слоёв GaN и электрофизических параметров 2DEG в AlGaN/GaN гетероструктурах выращенных методом NH_3 -МВЕ на подложках сапфира и кремния с использованием одинаковых конструкций буферного слоя.

В **Заключении** отражены основные результаты работы. Помимо этого, основные результаты и выводы представлены в конце каждой главы диссертации.

Глава 1 Аз-нитридные гетероструктуры для транзисторов с высокой подвижностью электронов

1.1 Нитрид галлия и транзисторы с высокой подвижностью электронов

Согласно заявлению Гордона Мура, закон об удвоении числа транзисторов, размещаемых на кристалле интегральной схемы, с периодичностью в два года, скоро потеряет свою справедливость, и соответственно, близок момент, когда возможности кремния, как главного материала полупроводниковой микроэлектроники, будут ограничены [17]. Создание и развитие материалов посткремниевой микроэлектроники является приоритетной задачей сегодняшнего дня. В данный момент наблюдается продолжение бурного развития GaN – широкозонного полупроводникового материала современной микроэлектроники. Узким местом GaN-приборов является их высокая стоимость, однако по мере внедрения GaN-технологии на коммерческих рынках (особенно в сегменте 5G- и 6G-инфраструктуры) ожидается снижение стоимости GaN-устройств в области стратегических применений. В середине 2010-х годов корпорация Huawei использовала GaN-технологии в удаленных радиоблоках приемопередатчиков базовых станций сетей 4G LTE. После этого, GaN-радиоприборы стали все чаще внедряться в коммерческие приложения телекоммуникационной инфраструктуры благодаря высокой плотности мощности и меньшему, по сравнению с кремниевыми и GaAs-решениями, форм-фактору. После развертывания 5G в суб-6-ГГц диапазоне GaN продемонстрировал свойства, которые превосходят существующую технологию LDMOS (полевой планарный металл-оксид-полупроводниковый транзистор с боковой диффузией) на основе кремния с точки зрения более высокой пропускной способности и более высоких требований к плотности мощности.

Нитрид галлия обладает максимальной высокой дрейфовой скоростью носителей заряда, при высоких электрических полях ($> 5 \times 10^4$ В/см) в

сравнении с GaAs, высокой критической напряженностью электрического поля, что позволяет использовать его в работе при более высоких напряжениях, частотах и температурах. У современных мощных GaN HEMT сопротивление в открытом состоянии в 40 раз меньше по сравнению с Si транзисторами по технологии металл-оксид-полупроводник с полевым эффектом (MOSFET). В таких же пропорциях это позволяет сократить площадь чипа, сохранив при этом значения сопротивления. Широкий диапазон преимуществ делает GaN наиболее перспективным материалом при постоянно растущем спросе в области СВЧ. Качественным преимуществом GaN перед другими широкозонными материалами, такими как карбид кремния и алмаз, является возможность создания ГЭС, что обеспечивает широкие предпосылки вариации зонной структуры, создания низкоразмерных ГЭС с новыми физическими свойствами, получение 2DEG с высоким уровнем электрофизических параметров.

1.2 Полярность и поляризация Аз-нитридов, природа формирования 2DEG

Формирование 2DEG в гетероструктурах на базе Аз-нитридов, включая их твердые растворы, в определяющей степени связано с сильной поляризацией (спонтанной и пьезоэлектрической) данных материалов. Наиболее очевидной демонстрацией данного утверждения являются приведённый ниже факт. Для полупроводников, в особенности для широкозонных полупроводников, для появления проводимости *n*-типа, чаще всего, необходимо легирование достаточно мелкими донорами, то есть обычными для полупроводников поставщиками электронов в зону проводимости. С другой стороны, хорошо известен экспериментальный факт самопроизвольного появления проводящего канала с высокой плотностью двумерного электронного газа на гетерогранице AlGaN/GaN (и других широкозонных материалов) без легирования слоёв ГЭС какими-либо донорами [18]. Этому явлению в настоящем разделе будет уделено особое

внимание, чтобы изложить необходимое и достаточное понимание механизмов, лежащих в его основе, поскольку формирование двумерного электронного газа в нитридных гетероструктурах для НЕМТ является ключевым моментом.

Появление электрического поля или поляризации в определенных кристаллических диэлектриках или широкозонных полупроводниках основывается на структурных особенностях этих материалов, а именно на полярности таких материалов. Структурные свойства кристаллов, в частности тип кристаллической решётки, определяют их электронные свойства. В A_3 -нитридах со структурой вюрцита отсутствует центр инверсии (направления (0001) и $(000\bar{1})$ не эквивалентны), что делает эти материалы полярными, и это в свою очередь порождает поляризацию в материале, то есть появление зарядов вблизи границ, а значит и появление электрического поля. На рисунке 1 схематично изображены вюрцитные структуры GaN с металлической и азотной полярностями. В направлении (0001) чередуются пары плоскостей Ga-N с расстоянием между ближними плоскостями атомов Ga и N $0,643 \text{ \AA}$, а период между плоскостями Ga-Ga (N-N) составляет $2,593 \text{ \AA}$. В случае металлической полярности поверхность кристалла детерминирована атомами металлов третьей группы и в середине тетраэдра расположен атом галлия. Для материала азотной полярности характерно детерминирование поверхности атомами азота, а в середине тетраэдра, соответственно, расположен атом азота. Упрощённо в направлении роста структура GaN металлической полярности может рассматриваться как набор плоскостей с расстояниями $0,643 \text{ \AA}$ внутри одного бислоя и расстояниями $1,95 \text{ \AA}$ между бислоями (см. рисунок 2).

Поляризацией материала обычно называют дипольный момент, приходящийся на единицу объема $P = \frac{1}{v} \cdot \left[-e \cdot \sum_i R_i \cdot Q_i + \int dr \cdot r \cdot p(r) \right]$. В свою очередь сам дипольный момент дискретной системы зарядов в классической электростатике равен сумме произведений зарядов на координату $d = \sum_j r_j \cdot q_j$.

Следует отметить, что полярность и поляризация по своей сути и своему происхождению являются объемными свойствами, хотя и проявляются на границах (поверхностях) или гетерограницах материала.

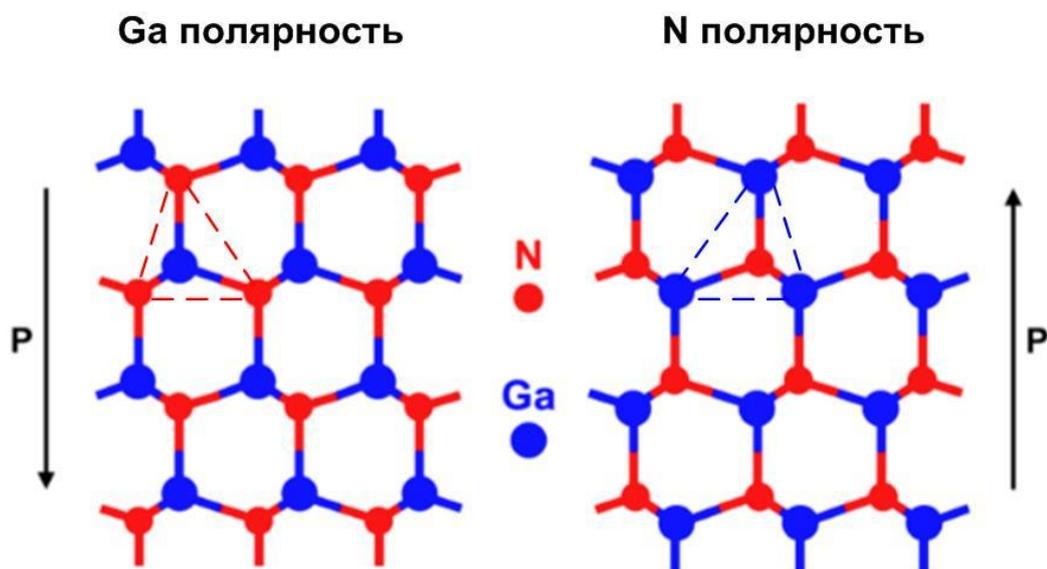


Рисунок 1 – Схематичная плоская структура вюрцитного GaN металлической и азотной полярности

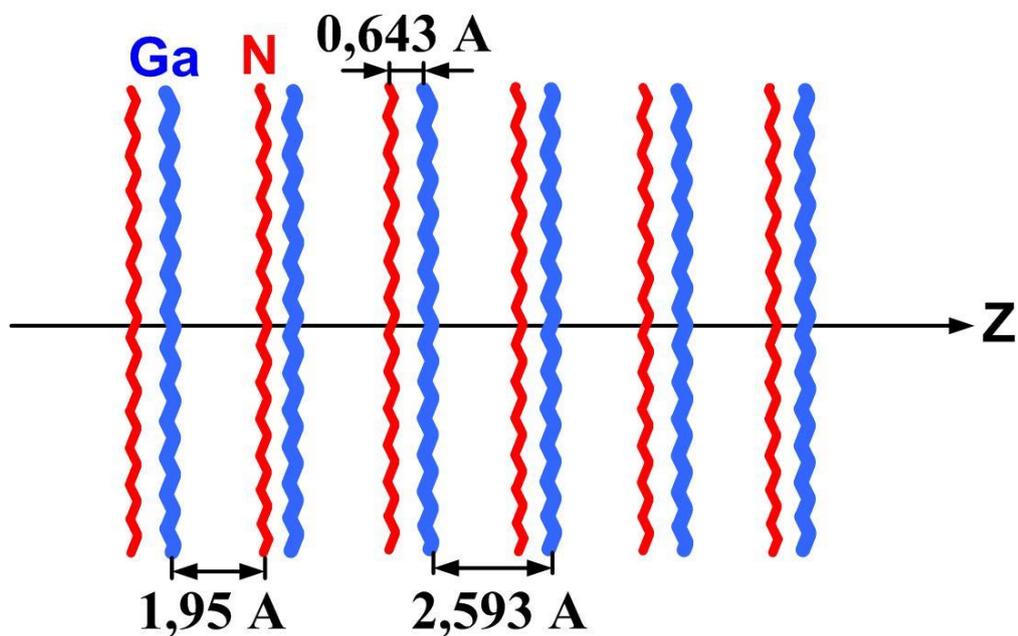


Рисунок 2 – Схематичное представление GaN металлической полярности в виде одномерной структуры с однородными расположенными параллельно плоскостями Ga и N

Несмотря на простое определение, при объяснении электрической поляризации кристаллического твердого тела обнаруживаются определенные сложности.

Во-первых, хорошо известно, что для конечной системы зарядов, в которой полный суммарный заряд не равен нулю, дипольный момент оказывается зависящим от выбора начала отсчета, поскольку при смещении \mathbf{R} начала координат меняются значения векторов \mathbf{r}_i (скажем, на \mathbf{r}'_i) и дипольный момент преобразуется как $d' = \sum_i \mathbf{r}'_i \cdot q_i = \sum_i \mathbf{r}_i \cdot q_i + \mathbf{R} \cdot Q = d + \mathbf{R} \cdot Q$, где $Q = \sum_i q_i$ это полный ненулевой заряд системы. Важно отметить, что в твердом теле, как правило, не заряженном в целом, и где суммарный заряд отдельной элементарной ячейки обычно тоже равен нулю, такой неоднозначности не возникает.

Во-вторых, при описании макроскопических объемных (не поверхностных) свойств твердых тел часто используют величины, нормированные на единицу объема, или на одну элементарную ячейку, например: плотность атомов самого материала, уровень легирования, плотность подвижных носителей или плотность фиксированного заряда, кроме того, магнитный момент, энтропия, теплоемкость и многие другие величины оказываются в трехмерном случае хорошо определены именно для единицы объема. Для двумерного и одномерного случая – такого рода величины определяются на единицу площади или на единицу длины, соответственно. Однако для определения электрической поляризации материала, как объемного свойства кристаллического твердого тела, то есть для бесконечной периодической структуры, такой подход оказывается противоречивым, поскольку дипольный момент элементарной ячейки, или единицы объема, оказывается, определен неоднозначно [19-23]. Хорошо известен общепринятый подход и классическая формула Клаузиуса — Моссотти. Согласно этой модели, когда среда состоит из отдельных, определенных поляризующихся частиц (молекул), или диполей, для определения дипольного момента в кристалле можно просуммировать вклады

этих известных диполей и поделить полученную сумму на объем (или на длину в одномерном случае). Но в периодической структуре твердого тела дипольный момент элементарной ячейки, если он имеется, окажется зависящим от выбора самой элементарной ячейки. Следует отметить, что выбор элементарной ячейки является произвольной операцией, поскольку главное при этом выборе — это обеспечить возможность построения всего кристалла из выбранных элементарных ячеек с помощью соответствующих трансляций.

В-третьих, для рассматриваемых здесь A_3 -нитридов есть интуитивное стремление в направлении c (0001) приписать плоскостям азота отрицательный знак (анионная подрешетка), а плоскостям металлов третьей группы (Ga, Al) положительный заряд (катионная подрешетка). Поскольку из-за большей электроотрицательности атомов азот частично смещает электронную плотность на себя, азотной поверхности GaN (000–1) следует приписать поляризационный заряд «–», а противоположной металлической поверхности образца (0001) поляризационный заряд «+». Однако, такое интуитивное стремление является некорректным и противоположным тому, что известно про поляризацию A_3 -нитридов из экспериментальных данных [24, 25].

Объяснение природы возникновения поляризации в непроводящем кристаллическом твердом теле (изоляторе или полупроводнике) и расчет поляризации (и поляризационных зарядов), в частности, для A_3 -нитридов, которые согласуются с экспериментальными данными, осуществляется в рамках «современной теории поляризации» (modern theory of polarization), благодаря, главным образом, работам Реста и Вандербильт [19,22,23,26]. Прежде всего, в данных работах утверждается и доказывается, что невозможно однозначно определить поляризацию объемного материала через дипольный момент единичного объема твердого тела или исходя из элементарной ячейки твердого тела, так как поляризация (дипольный момент) элементарной ячейки в твердом теле зависит от выбора ячейки и от её формы

[20,21]. Кроме того, показано, что существует множество решений для поляризации, представляющие из себя периодические ветви зависимостей поляризации от внешних параметров (электрического поля, механического напряжения или деформации), с периодом изменения поляризации $e\mathbf{R}/V$, где \mathbf{R} вектор решетки твердого тела, а V объём элементарной ячейки. Содержание современной теории поляризации, кратко изложено ниже.

Поляризация (как и полярность) твердого тела это объемное свойство, связанное с некоторым перетеканием зарядов (с током), которое может проявляться в конечном итоге, например, в виде поверхностных зарядов (или зарядов на гетерограницах) для образцов конечных размеров. Необходимо подчеркнуть, что здесь речь идет о связанных зарядах, например, об электронах в валентной зоне, а не о свободных носителях заряда в зоне проводимости. Твердое тело рассматривается как изолятор или полупроводник, и ни при каких внешних воздействиях не становится проводником. При этом, измеряется в эксперименте, а также доступна для корректного теоретического расчета не абсолютная величина поляризации \mathbf{P} , поскольку, как показано в работах [21,23,26], возникает много решений представляющих из себя «поляризационные ветви», отличающиеся на «квант поляризации $e\mathbf{R}/V$ », а изменение поляризации $\Delta\mathbf{P}$, т.е. разностные (или дифференциальные) величины поляризации, взятые для одной и той же ветви решений. Именно использование разностной величины позволяет устранить неоднозначность, связанную с множеством «поляризационных ветвей» [21,23,26]. Интересную аналогию приводят в своей работе Реста и Вандербильт, сравнивая определение величины поляризации с нахождением остатка при делении [26]. Изменение поляризации регистрируется или рассчитывается при вариации какого-либо внешнего параметра, влияющего на поляризацию. Таким параметром может быть деформация или механическое напряжение для пьезоэлектрика, внешнее электрическое поле для сегнетоэлектрика (в англоязычной литературе ферроэлектрика), или формирование определенных полярных кристаллических структур,

обеспечивающих поляризацию таких материалов, в частности, таких как A_3 -нитриды.

Полная величина поляризации определяется двумя вкладками – ионным и электронным ($\mathbf{P}=\mathbf{P}_{\text{ion}}+\mathbf{P}_e$). Ионный вклад в этом случае связан с периодической структурой точечных положительных зарядов. Разумеется, при наличии в решетке твердого тела нескольких видов атомов заряды соответствующих ионов (остовов) тоже могут отличаться. Ионный вклад в поляризацию рассчитывается суммированием произведений соответствующих зарядов на их координаты. Важно подчеркнуть, что неоднозначность определения поляризации с точностью до кванта поляризации $e\mathbf{R}/V$ характерна для обоих вкладов - ионного и электронного [26]. Электронный вклад в поляризацию делокализованных Блоховских волновых функций представляет повышенный научный интерес, и определенную сложность при расчете. Этот вклад, казалось бы, можно было бы описать с помощью классического выражения

для элементарной ячейки $\mathbf{P}_e(\Omega)=\frac{1}{\Omega}\int_{\Omega}\mathbf{r}\cdot\rho_e(\mathbf{r})d\mathbf{r}$, где $\rho_e(\mathbf{r})$ электронная плотность,

а Ω – объем выбранной элементарной ячейки. Однако такое определение не приводит к корректному результату, поскольку такая величина окажется зависящей от того или иного выбора элементарной ячейки (от формы ячейки).

Кроме того, при расчётах поляризации с использованием делокализованных Блоховских функций, описывающих электроны в твердом теле, надо оставаться на одной ветви решений для поляризации. Отправным пунктом создания теории являлось выражение изменения поляризации при вариации внешнего параметра по замкнутому контуру в пространстве параметров

$\oint\frac{\partial\mathbf{P}_e}{\partial\lambda}d\lambda=\frac{e\mathbf{R}}{\Omega}$, для которого была продемонстрирована и явно представлена

неоднозначность определения поляризации с точностью до величины $e\mathbf{R}/\Omega$ (иногда называемой квантом поляризации).

Для описания \mathbf{P}_e в современной теории было разработано два формализма. В одном формализме, электронный вклад \mathbf{P}_e количественно можно описать через расчет смещения локальной электронной плотности в

элементарной ячейке относительно узлов решетки, или, скажем, атомных остовов (ионов). Такие смещения связаны с положением центров заряда для локализованных волновых функций Ванье, полный набор которых (или их сумма) корректно описывает поведение электронной плотности. В эти зарядовые центры можно разместить эффективные отрицательные точечные заряды (см. рисунок 3), которые эффективно заменяют (представляют) электронную плотность соответствующих функций Ванье (см. рисунок 3). Далее можно в расчетах использовать такую классическую карту точечных зарядов, эффективно заменяющих электронную плотность [19].

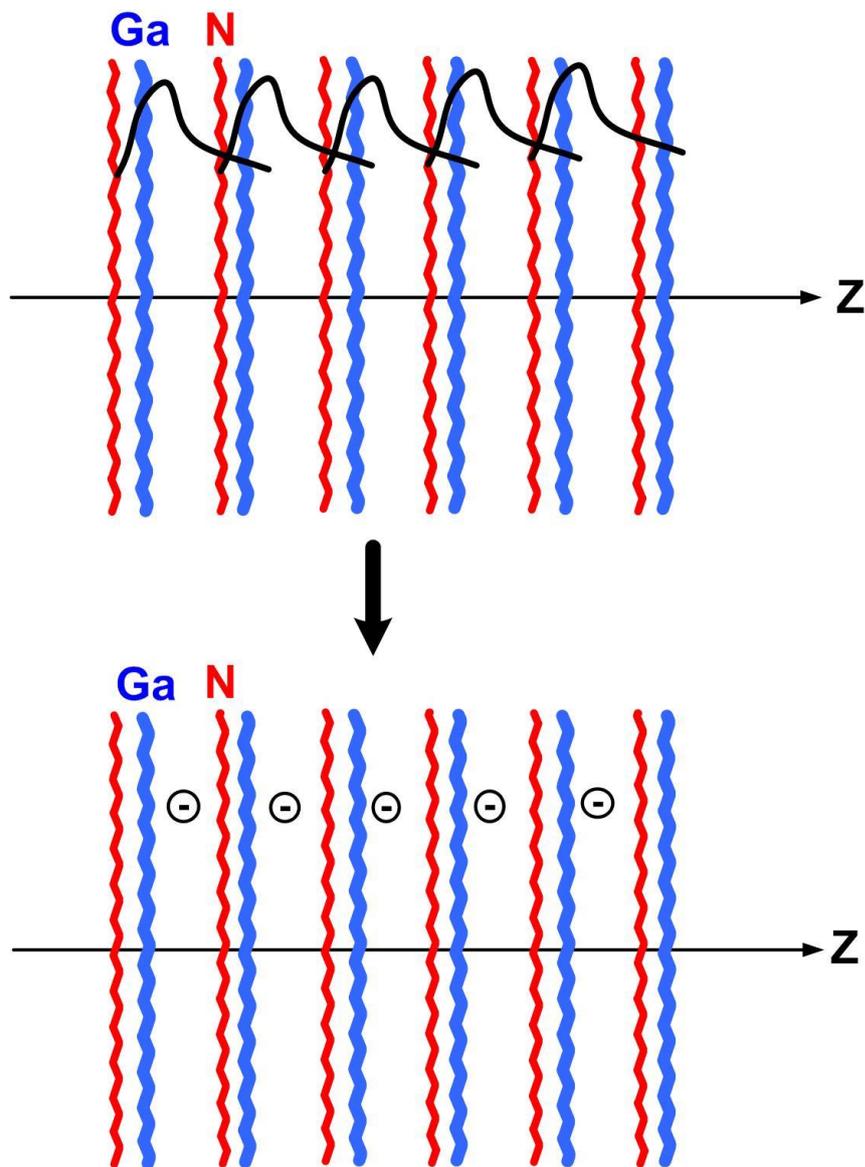


Рисунок 3 – Схематичное представление локализованных функций Ванье в виде карты зарядовых центров

Другой теоретический формализм основан на вычислении, так называемой, фазы Берри для делокализованных Блоховских волновых функций, позволяющей рассчитать ветви решений для поляризации. Расчеты в обоих случаях основываются на теории функционала плотности. Из работ [19,21-23,26] следует, что оба данных подхода являются эквивалентными и в результате вычислений дают одинаковые значения спонтанных поляризаций для A_3 -нитридных слоёв.

Соотношение поляризации \mathbf{P} и связанного заряда σ на поверхности или интерфейсе, в конечном счете, может быть выражено простой формой $\sigma = \mathbf{P} \cdot \mathbf{n}$, где \mathbf{n} - нормаль к соответствующей поверхности. Современная теория поляризации позволила адекватно рассчитать поверхностные и интерфейсные плотности зарядов для полярных материалов, в том числе для A_3 -нитридов [25], что позволяет построить зонные диаграммы гетеропереходов и далее понять механизм формирования двумерного электронного газа. Для того, чтобы получить хорошо известную зонную диаграмму гетерограницы AlGaIn/GaN, вблизи которой образуется двумерный газ, сначала необходимо рассмотреть упрощенную задачу с однородно заряженными поляризационными плоскостями, а затем необходимо решить самосогласованные уравнения Шредингера и Пуассона.

Как только в твердом теле появляются электрические поля, это приводит к появлению на энергетических диаграммах наклонов зон (проводимости и валентной зон) от координаты. При больших толщинах слоев наклон зон приводит к пересечению зоны проводимости и валентной зоны с уровнем Ферми, благодаря чему появляются свободные носители заряда, которые, в свою очередь, экранируют спонтанные электрические поля. Однако основным источником электронов в 2DEG, согласно работам [27], являются поверхностные состояния (см. рисунок 4). Этот факт следует из экспериментально определённой зависимости плотности двумерного газа от толщины барьерного слоя, которая до определенной толщины равна нулю, а с

некоторой критической толщины начинает расти и выходит на насыщение (см. рисунок 5).

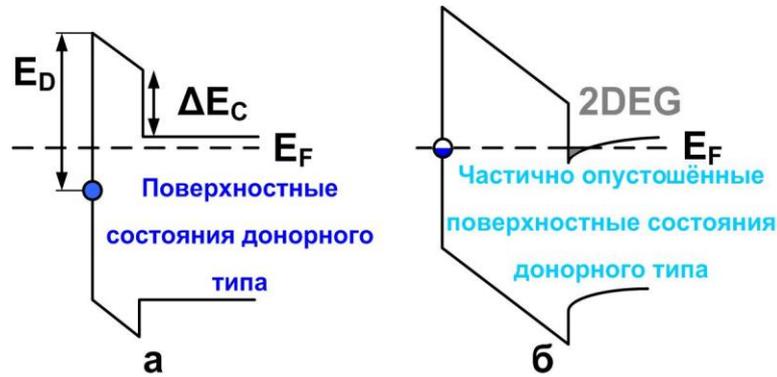


Рисунок 4 – Зонная диаграмма, иллюстрирующая положение поверхностных донорных состояний от толщины барьера нелегированного AlGaN:
a – меньше, *б* – больше критической толщины образования 2DEG

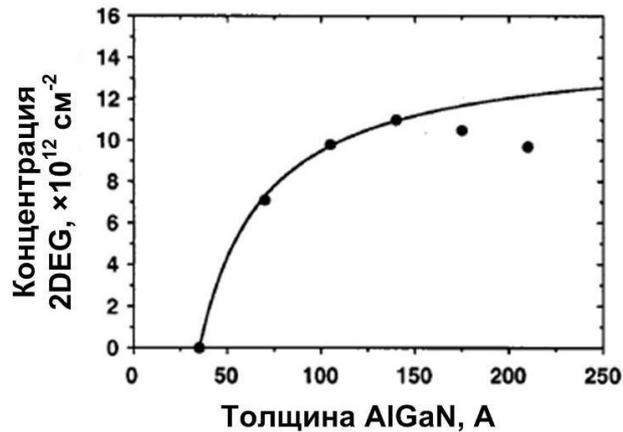


Рисунок 5 – Экспериментальная зависимость плотности носителей заряда 2DEG от толщины барьерного слоя AlGaN [27]

Описанные выше современные представления о поляризации и формировании двумерного электронного газа проясняют физическую природу возникновения свободных носителей на границе гетероперехода AlGaN/GaN. Центральное место на зонной диаграмме гетероперехода AlGaN/GaN, приведённой на рисунке б, отводится треугольной квантовой яме в зоне проводимости, которая находится ниже уровня Ферми и в которой находятся свободные носители заряда.

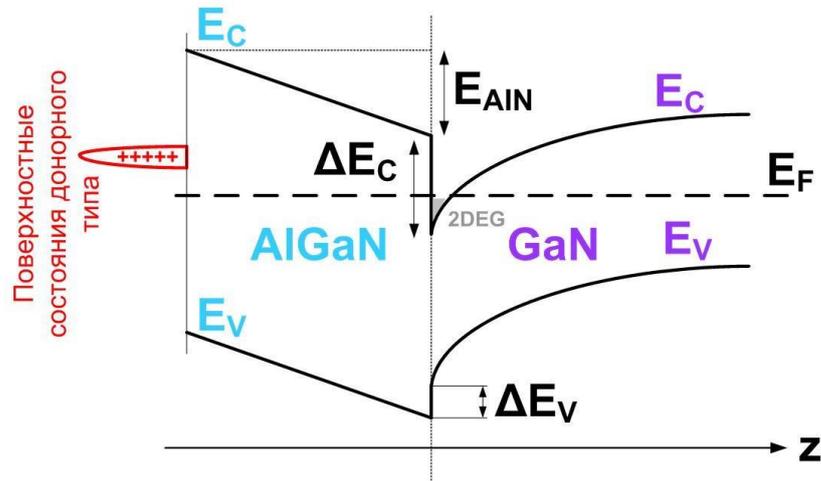


Рисунок 6 – Равновесная зонная диаграмма гетероперехода AlGaN/GaN

1.3 Дрейфовая скорость электронов в GaN

Значения подвижности электронов в двумерном газе GaN ГЭС уступают значениям подвижности в GaAs гетероструктурах, прежде всего, из-за разницы в эффективных массах электронов: GaN – $0,2 m_e$, GaAs – $0,063 m_e$. Однако при повышенных электрических полях, которые используются при работе транзисторов, более важной характеристикой становится не подвижность носителей, а максимальная дрейфовая скорость насыщения. Эта дрейфовая скорость оказывается значительно выше скоростей в GaAs ГЭС. На рисунке 7 приведены сравнительные зависимости дрейфовой скорости от приложенного поля для различных материалов современной микроэлектроники. Более высокая концентрация носителей и высокая дрейфовая скорость позволяют получать большие токи вместе с повышенными напряжениями, а также позволяют повысить мощность и уменьшить размеры конечных устройств, в конструкцию которых входят нитридные НЕМТ транзисторы. Как сказано выше, преимущества высокочастотных транзисторов на основе нитридных структур основываются на возможности получения более высокой проводимости канала, чем в структурах на основе классических A_3B_5 ГЭС (AlGaAs/GaAs), значительно большей напряженности пробойного поля и меньшей чувствительности к температуре, а также большей теплопроводности, обеспечивающих

возможность работы приборов при высоких мощностях и температурах [1, 2]. Для реализации таких приборов необходимы ГЭС с высокой проводимостью канала, тонким барьером, высокими пробивными напряжениями и малыми токами утечки.

Ключевым моментом при конструировании транзисторных гетероструктур с двумерным электронным газом на основе GaN является формирование широкозонного барьера, который обеспечивает появление 2DEG, его локализацию вблизи гетерограницы за счёт разности в спонтанной поляризации материалов барьера и канала в совокупности с пьезоэлектрической поляризацией, которая приводит к появлению донорных поверхностных состояний, расположенных выше уровня Ферми. Конструкция барьера наряду со структурным совершенством материала определяет значения концентрации и подвижности двумерных электронов. Эти параметры задают наиболее важные характеристики мощных полевых СВЧ и силовых транзисторов: выходную мощность, коэффициент полезного действия, крутизну проходной характеристики, коммутируемые напряжения, коммутируемые токи, частоту переключения и т.д.

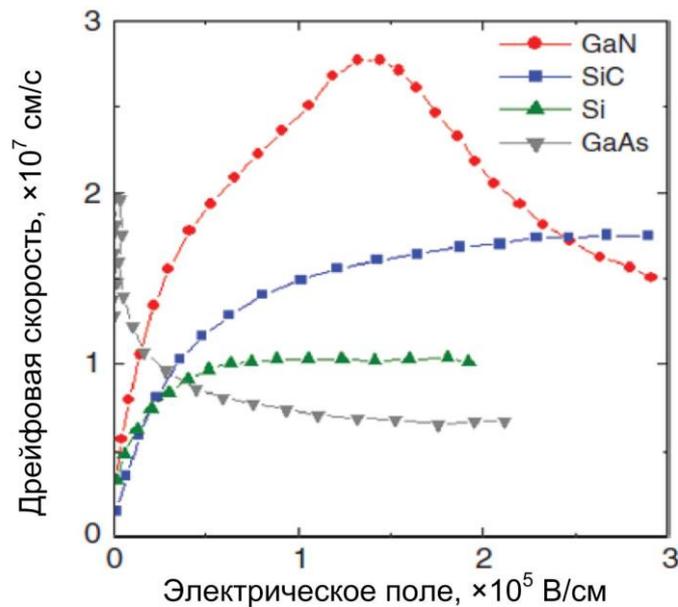


Рисунок 7 – Изменение дрейфовой скорости электронов при изменении электрического поля для различных материалов [28]

1.4 Типы гетероструктур, используемые при изготовлении GaN-HEMT

Спонтанная поляризация прямозонных A_3 -нитридов наряду с возможностью эпитаксиального формирования гетеропереходов, соединяющих слои A_3 -нитридов разных составов, позволяют, используя методы зонной инженерии синтезировать разнообразные гетероструктуры с двумерным электронным газом. Формально разнообразие таких гетеропереходов очень велико, учитывая возможность использования трех металлов третьей группы для получения нитридов GaN, AlN, InN и их твердых растворов разного состава. Выбор той или иной пары материалов для создания гетероперехода с 2DEG зависит от поставленных исследовательских или прикладных задач. Гетероструктуры с 2DEG получают при использовании в качестве активного слоя более узкозонного материала и более широкозонного материала в качестве барьерного слоя, тогда вблизи гетероперехода со стороны узкозонного материала образуется треугольная квантовая яма, где и формируется 2DEG. Исторически сложилось так, что первой реализованной и потому наиболее широко исследованной и применяемой структурой является гетеропара $Al_xGa_{1-x}N/GaN$, с долей Al около 25-30%.

Гетеропары разных материалов отличаются величинами запрещенных зон и разными разрывами зон на границе в зоне проводимости и в валентной зоне, а также разными величинами спонтанных (и пьезоэлектрических) поверхностных зарядов на границах слоев из-за различия поляризационных свойств материалов гетеропары. Соответственно, использование различных гетеропар приводит к различиям треугольных квантовых ям. В свою очередь квантовые ямы разной ширины и глубины, отличаются разными наборами локализованных (по оси z - перпендикулярно к гетерогранице) квантовых уровней и концентрацией носителей заряда, что открывает возможность выбирать наиболее подходящую под конкретную задачу конструкцию гетероструктуры.

Начиная с экспериментальной работы 1991 года Азиф Хана [29], когда был получен слой чистого и достаточно совершенного GaN, в котором подвижность носителей (электронов) составляла $350 \text{ см}^2/\text{В}\times\text{с}$, а концентрация $1.0\times 10^{17} \text{ см}^{-3}$, можно отсчитывать историю попыток создания транзисторов на основе GaN. Когда в 1998 были опубликованы результаты Гаски [30,31] для гетероструктур $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{GaN}$ с двумерным электронным газом, стали очевидны возможности А_3 -нитридов для практических применений в области мощных и высокочастотных транзисторов. Важно отметить, что высокие параметры транспортных свойств электронов в AlGaN/GaN ГЭС (подвижность электронов в двумерном газе $\sim 2000 \text{ см}^2/\text{В}\times\text{с}$ при концентрации носителей заряда около $1\times 10^{13} \text{ см}^{-2}$) ранее предсказывались теоретически [32,33]. Во всем мире была проведена большая экспериментальная технологическая работа по оптимизации и повышению качества гетероструктур AlGaN/GaN для НЕМТ [34,35]. Кроме того, была также проделана огромная работа по оптимизации конструкции транзистора: подбор геометрических размеров, формирование омических контактов и барьера Шотки, оптимизация формы затвора и его заглабление и т.д. Однако, подробно эти вопросы в данной диссертации рассматриваться не будут, поскольку предметом исследования, являлось создание технологии роста. К одним из лучших достижений, полученных на транзисторных структурах на гетеропаре AlGaN/GaN , можно отнести результаты [36], где была продемонстрирована рекордная плотность мощности транзистора $10,5 \text{ Вт/мм}$, измеренная при 40 ГГц . В работе [37] продемонстрирован транзистор с рекордной максимальной частотой усиления 300 ГГц .

Увеличение мольной доли Al в барьерном слое AlGaN (вплоть до бинарного материала AlN) способствует повышению концентрации двумерного электронного газа благодаря увеличению спонтанного и пьезоэлектрического поляризации зарядов на гетерогранице AlN/GaN , и, соответственно, увеличению проводимости канала транзистора. В начале 2000-ых годов прилагались усилия для преодоления технологических

проблем, связанных с формированием бинарного барьерного слоя AlN на GaN, причиной которых служило рассогласование параметров решетки AlN и GaN и низкое качество выращиваемого барьерного слоя AlN, а иногда и его растрескивание. В процессе данных исследований также было обнаружено, что вставка тонкого AlN между AlGaN и GaN позволяет повысить подвижность (за счёт снижения сплавного рассеяния) и концентрацию электронов в канале, благодаря увеличению пьезоэлектрической поляризации [38,39].

Амбахер в своей работе [40] выдвинул аргумент, что повышение мольной доли Al в барьерном слое до чистого бинарного AlN хотя и повышает концентрацию 2DEG вплоть до $5 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$, однако из-за возрастающих упругих механически напряжений для псевдоморфного слоя имеет ограничение по толщине AlN ~ 4 нм, выше которой наступает релаксация напряжений с ухудшением качества вплоть до растрескивания барьерного слоя. Однако, в работе Цао и Джены [41] показано, что концентрация 2DEG может изменяться на порядок от 5×10^{12} до $5 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$ при варьировании толщины барьерного слоя AlN от 2 до 7 нм. Обнаружено, что окно подвижности носителей заряда свыше $1000 \text{ см}^2/\text{В} \times \text{с}$ соответствует толщине AlN от 2,3 до 5 нм, при этом концентрация электронов варьируется в диапазоне $(1-3) \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$. Высококачественные гетероструктуры AlN/GaN экспериментально продемонстрированы в работах [42-45]. Так в работе [42] продемонстрирован двумерный газ с подвижностью $> 1800 \text{ см}^2/\text{В} \times \text{с}$ и концентрацией $> 3 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$, а в работе [45] достигнуто рекордно низкое слоевое сопротивление канала $< 150 \text{ Ом}/\square$, важно отметить, что типичные электрофизические параметры для классических AlGaN/GaN гетероструктур характеризуются слоевым сопротивлением канала $\sim 300 \text{ Ом}/\square$ при концентрации электронов $\sim 3 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$.

В последнее время активно ведутся работы по использованию InAlN в качестве барьерного слоя [46,47]. Одним из первых в 2001 году образование двумерного газа в InAlN/GaN ГЭС рассмотрел в своей теоретической работе

Кузьмика [48]. Было показано, что, по сравнению с традиционными структурами AlGaN/GaN, гетероструктуры на основе InAlN/GaN должны демонстрировать в два-три раза более высокий поляризационный заряд. Было предсказано, что это должно приводить к увеличению тока в двумерном канале примерно на 200%. В работе [49] продемонстрировано, что при мольной доле In около 17% возможно выращивать полностью согласованные по параметру решетки InAlN/GaN ГЭС. Оказалось, что при использовании $\text{In}_{0,17}\text{AlN}$ барьерного слоя, можно получать более высокие плотности 2DEG (чем в традиционных AlGaN/GaN ГЭС) только за счет спонтанной поляризации при отсутствии пьезоэлектрической поляризации. Такие InAlN/GaN ГЭС и HEMT транзисторы на их основе были экспериментально реализованы несколько позднее в 2006 году и результаты опубликованы в работах [50, 51]. Достигнутая в работе [51] плотность тока в канале HEMT, изготовленного на основе InAlN/GaN ГЭС, составила 2 А/мм при комнатной температуре, что почти на 30% превышает плотность тока в канале для классических HEMT, формируемых на AlGaN/GaN гетероструктурах.

В ряде работ было проведено сравнение ГЭС InAlN/GaN и транзисторов на их основе с традиционной AlGaN/GaN ГЭС с различными составами [52, 53]. В работе [53] были изучены и сопоставлены транспортные свойства гетероструктур AlGaN/AlN/GaN и InAlN/AlN/GaN с высокой плотностью электронов в 2DEG. Для традиционной гетероструктуры $\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ подвижность электронов при комнатной температуре составила $1700 \text{ см}^2/\text{В}\times\text{с}$ при концентрации электронов $8,44 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$, что привело к слоевому сопротивлению $435 \text{ Ом}/\square$. Образец гетероструктуры с барьерным слоем на основе $\text{In}_{0,12}\text{Al}_{0,88}\text{N}$ продемонстрировал очень высокую концентрацию электронов 2DEG ($4,23 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$), при этом подвижность электронов составила $812 \text{ см}^2/\text{В}\times\text{с}$ при комнатной температуре. В последнем образце получено очень низкое слоевое сопротивление $182 \text{ Ом}/\square$.

В работе Ленки и др. [54] рассмотрено влияние различных конструкций гетероструктуры с использованием тонких вставок (In, Al, Ga)N между InAlN

барьером и активным слоем GaN. Сделан вывод, что HEMT на основе $\text{In}_{0,17}\text{Al}_{0,83}\text{N}/\text{GaN}$ может превзойти типичный HEMT на основе AlGaIn/GaN по всем параметрам.

В 2008 году было обнаружено аномальное (до 400%) увеличение пьезоэлектрического модуля d_{33} в твердом растворе $\text{Sc}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ при увеличении мольной доли Sc в растворе до 50% в сравнении с исходной вюрцитной структурой AlN [55]. Причина этого явления на данный момент не изучена, однако основная гипотеза состоит в изменении упругих констант при образовании вблизи гетерограницы неизвестных гексогональных фаз [56]. В работе [57] предложено использовать новый тип нитридных гетероструктур ScAlN/GaN для которых, продемонстрирована концентрация электронов в 2DEG $\sim 3,4 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$, при подвижности носителей заряда $> 900 \text{ см}^2/\text{В} \times \text{с}$. Позднее подобные ГЭС были синтезированы методами MBE и газовой фазной эпитаксии из металлоорганических соединений (МОСГФЭ) [58,59]. Расчеты поляризационных зарядов в гетероструктурах ScAlN/GaN и для других A₃-нитридов гетеропереходов были тщательно произведены в работе [40]. В настоящее время проводятся исследования параметров транзисторов на основе ScAlN/GaN гетероструктур [60], продемонстрированы характеристики транзисторов и обнаружены определенные проблемы, например, нестабильность порогового напряжения [61].

Сравнение транзисторов изготавливаемых с применением различных полупроводниковых материалов, включая, GaN-HEMT транзисторы представлено на рисунке 8. Мировой рынок устройств на базе GaN представлен ключевыми компаниями в США, Европе, Азиатско-Тихоокеанском регионе, Латинской Америке, Ближнем Востоке и в Африке: Ampleon (<http://www.ampleon.com/>) – производство мощных GaN транзисторов СВЧ-диапазона; Avogy – силовые приборы на напряжения до 600В; Cree Incorporated – компания удерживает вторую позицию в мире по производству мощных GaN транзисторов СВЧ-диапазона; в августе 2016 г. компания Dialog Semiconductor анонсировала и продемонстрировала первую GaN ИС DA8801

для применения в зарядных устройствах, изготовленную по 650 вольтовой GaN-на-Si технологии на базе Taiwan Semiconductor Manufacturing Corporation (TSMC); GaN Systems – силовые приборы с напряжением до 650В. Компания IMEC недавно освоила технологию производства *p*-GaN/AlGaN/GaN нормально-закрытых силовых транзисторов на кремниевых подложках диаметром 200 мм. Технология изготовления этих транзисторов не раскрывается.

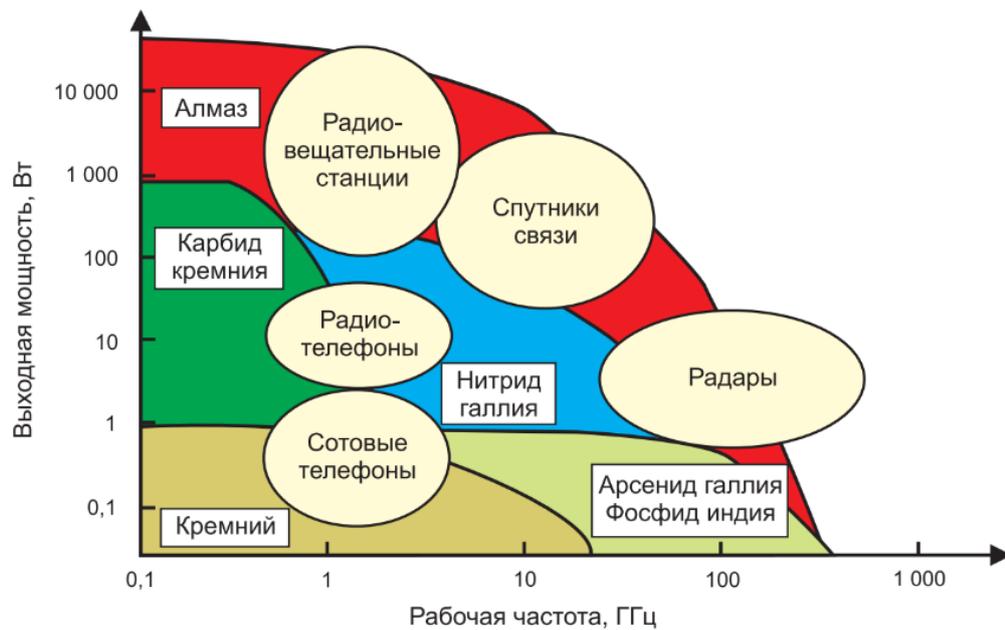


Рисунок 8 – Сравнение мощных СВЧ-транзисторов

1.5 Технологические задачи требующие решения при росте AlGaN/GaN ГЭС на кремниевых подложках

Как уже было сказано в актуальности диссертационной работы востребованность AlGaN/GaN ГЭС на кремнии продиктована, высоким кристаллическим совершенством кремниевых подложек, коммерческой доступностью подложек кремния большого диаметра (до 200 мм), высокой теплопроводностью и перспективой интеграции GaN технологии в развитую планарную кремниевую технологию с широкой номенклатурой элементной базы [62]. Синтез эпитаксиальных A_3 -нитридных ГЭС для изготовления полевых транзисторов с 2DEG на подложках кремния является возможным,

поскольку поверхность Si(111) обладает необходимой гексагональной структурой, которая достаточно хорошо подходит для эпитаксиального роста A_3 -нитридных кристаллических пленок с ориентацией (0001). Соотношение параметров кристаллических решеток подложки Si(111) и слоя AlN, который обычно используют в качестве зародышевого слоя на Si(111), достаточно близко (с точностью около 1 %) согласуется с целочисленным отношением 4:5 [63], то есть $4 \times a_{\text{Si}}(3,84 \text{ \AA}) \approx 5 \times a_{\text{AlN}}(3,11 \text{ \AA})$.

Одними из ключевых параметров, определяющих предельные характеристики СВЧ транзисторов, являются подвижность электронов 2DEG в низких электрических полях и/или максимум дрейфовой скорости электронов в высоких электрических полях. Исследованию механизмов рассеяния носителей заряда в AlGaN/GaN гетероструктурах посвящено множество работ, например [11, 12]. Теоретический предел, ограничивающий подвижность носителей заряда в 2DEG, связывают с рассеянием электронов на оптических фононах. Помимо этого, важную роль в рассеянии играют такие механизмы, как рассеяние на шероховатостях гетерограницы, сплавное рассеяние, кулоновское рассеяние на остаточных донорах и рассеяние электронов в деформационных полях вокруг дислокаций [13]. В работе [64] Фабио Алессио Марино с коллегами исследовал влияние механизмов рассеяния на параметры СВЧ-транзисторов. Были выявлены различные режимы деградации транзисторов, связанные с рассеянием электронов на дефектах в кристалле, в том числе снижение тока стока и крутизны вольт-ампертных характеристик (ВАХ). Марино с соавторами установлено, что при пороговом значении плотности дислокаций ($> 10^{10} \text{ см}^{-2}$) транспортные свойства GaN транзисторов начинают серьезно ухудшаться, а именно ток стока и крутизна ВАХ уменьшаются в более чем два раза. Аналогичная ситуация обстоит и с частотными характеристиками транзисторов. Комплексное исследование влияния плотности дислокаций в слоях GaN на параметры 2DEG подробно описано в работе [65]. С этой целью авторы работы выращивали ГЭС с 2DEG на трёх различных подложках: SiC, темплата

GaN/Al₂O₃ и на собственных подложках GaN, добиваясь тем самым различных порядков значений плотности дислокаций в слоях GaN (от 5×10^7 до 2×10^{10} см⁻²). Исследователями из Санта-Барбары установлено, что снижение плотности дислокаций в слоях GaN с 2×10^{10} до 5×10^7 см⁻² приводит к увеличению подвижности носителей заряда 2DEG с 1000 до 1600 см²/В×с при комнатной температуре, а низкотемпературные измерения (~ 50К) демонстрируют увеличение подвижности с 2300 до 12 000 см²/В×с для ГЭС с типичным составом барьерного слоя Al_{0,25}Ga_{0,75}N.

Таким образом, получение гладкой морфологии активного слоя GaN и формирование резкой Al(Ga)N/GaN гетерограницы, в совокупности со снижением плотности дислокаций в активном слое GaN – важные шаги на пути к достижению предельных электрофизических параметров ГЭС для НЕМТ.

Существенной технологической проблемой при росте А₃-нитридных слоёв на подложках Si (111) является растрескивание эпитаксиальных пленок в процессе постростового охлаждения. Природа данной проблемы непосредственно связана с несоответствием параметров кристаллических решеток Si(111) и А₃-нитридов (~ 18%), а также с различием коэффициентов термического расширения (КТР) (~ 54%) [7], и, как следствие, приводящих к образованию в эпитаксиальном слое дефектов высокой плотности различной природы включая образование трещин [8,9]. Механизм образования трещин в слоях GaN-на-Si хорошо проиллюстрирован в работе [10]. Поэтому, при выборе конструкции буферного слоя при росте А₃-нитридных структур на подложках Si(111) требуется уделять особое внимание решению данной проблемы.

В работе [66] проведено исследование процесса формирования слоёв GaN на буферном слое AlGaN/AlN методом NH₃-МВЕ. Установлено, что плотность трещин уменьшается с увеличением толщины слоя AlGaN и стремится к нулю при достижении толщины около 250 нм, однако, дальнейшее увеличение толщины пленки приводит к повторному появлению

трещин. Авторы заключили, что оптимальными толщинами буферных слоев являются 120 нм для AlN и 250 нм для AlGaIn, подтверждая, что причинами растрескивания гетероструктур являются разница в КТР эпитаксиальных нитридных слоев и кремниевой подложки и упругие напряжения, возникающие в процессе охлаждения образца после роста. Исследователи из Греции и Польши в своей работе [67] использовали ступенчатое изменение состава в последовательности слоев AlGaIn для предотвращения релаксации напряжений в слоях GaN-на-Si, при этом в работе сообщается о том, что такая последовательность слоев AlGaIn так же выступает в роли дислокационного фильтра. Таким образом, авторам удалось достигнуть гладкой морфологии поверхности конечного эпитаксиального слоя GaN свободного от трещин.

Авторы работы [68] для решения проблемы растрескивания слоев GaN-на-Si использовали структуру, состоящую из тонкого зародышевого слоя AlN (70 нм) и сверхрешетки GaN/AlGaIn. Важно отметить, как полагают авторы, что, несмотря на возникновение растягивающих напряжений при охлаждении образцов, появления трещин удастся избежать, если полностью исключить образование аморфной фазы SiN на поверхности Si на начальных этапах роста и обеспечить высокую однородность зарождения AlN. В работе [69] сообщается об успешном создании свободных от трещин эпитаксиальных слоев GaN толщиной до 6,7 мкм на 4-х дюймовых подложках Si (111) методом МОСГФЭ. Авторам работы удалось достичь данного результата благодаря введению тонких слоев AlN в процессе эпитаксиального роста GaN. Слои AlN создают напряжения сжатия, компенсирующие растягивающие напряжения, возникающие из-за разности КТР подложки и нитридных слоев при охлаждении. Влияние различных сверхрешеток на деформации в пленках GaN-на-Si и процессы блокировки и аннигиляции дислокаций в сверхрешетках с использованием сканирующей ПЭМ и микро-КРС методик исследовалось в работе [70]. Авторы установили, что AlN/GaN сверхрешетки эффективно блокирует прорастающие

дислокации. Группа исследователей из CRHEA-CNRS (Франция), специализирующаяся на росте A_3 -нитридов методом NH_3 -MBE, в своей работе [71] предлагает для решения проблемы растрескивания слоёв GaN-на-Si использовать вставку в виде слоя AlN толщиной 250 нм, выращиваемую поверх 250 нм слоя GaN, находящегося на тонком зародышевом слое AlN. Основная идея использования такого буфера состоит в уменьшении растягивающих напряжений в слоях GaN, за счёт добавления слоя AlN, сжимающего слои GaN. Исследователи из Сингапура в своей работе [6] сообщают о более эффективном снижении растягивающих напряжений в слоях GaN-на-Si при вставке в слой GaN помимо 250 нм AlN дополнительного слоя AlGaN малого состава толщиной 250 нм.

Таким образом, можно заключить, что подавление образования трещин в слоях GaN, выращенных на подложках Si(111) заключается в компенсации возникающих растягивающих напряжений введением в конструкцию буфера слоёв, приводящих к сжатию слоёв GaN. Помимо этого, вероятно, на образование трещин влияет процесс нитридизации кремниевой подложки.

Не менее важной задачей при росте гетероструктур для транзисторов с высокой подвижностью электронов на основе соединений A_3 -нитридов является получение буферного слоя GaN с высокими значениями пробивного напряжения и низкими токами утечки. Как известно, слои GaN зачастую имеют n -тип проводимости из-за непреднамеренного легирования кислородом из остаточной атмосферы ростовой камеры в процессе роста слоёв [14].

Помимо этого, литературные данные, указывают на то, что вакансии азота (V_N) являются донорами, с энергетическим положением вблизи дна зоны проводимости, которые могут приводить к появлению свободных электронов в зоне проводимости, а вакансии Ga соответственно выступают в роли акцепторов. Электронная структура V_N в GaN описана в работе [72]. Удаление атома N приводит к появлению четырех оборванных связей Ga, которые в нейтральном заряженном состоянии заняты в общей сложности тремя электронами. В тетраэдрическом окружении структуры вюрцита эти

оборванные связи объединяются в одно энергетическое состояние вблизи середины запрещенной зоны и три состояния вблизи минимума зоны проводимости. Положение донорных уровней вакансий азота, согласно теоретическим расчетам, имеет большой разброс от 0,004 эВ до 0,33 эВ ниже дна зоны проводимости, существенный (двукратный) разброс имеется и в экспериментальных данных от 0,07 до 0,13 эВ [73]. Однако, расчеты [74] демонстрируют, что непреднамеренная проводимость n-типа, которая часто наблюдается в GaN после выращивания, не может быть отнесена к вакансиям азота, а является следствием непреднамеренного включения донорных примесей. Собственные точечные дефекты могут играть роль в компенсации, что проявляется и в таких явлениях, как желтая люминесценция, наблюдаемая в слоях GaN, которая, по мнению авторов, может быть отнесена к вакансиям галлия. Так же, следует принимать во внимание, что на активацию носителей из вакансий влияет положение уровня Ферми в GaN и наличие сильных поляризационных полей. Картина усложняется из-за возможности проявления нескольких зарядовых состояний вакансий, образования комплексов точечных дефектов, в частности вакансий с различными примесями и различных механизмов компенсации и самокомпенсации, все перечисленные явления зависят от температуры роста и соотношения потоков реагентов используемых при росте слоёв GaN.

Существует два подхода к подавлению проводимости в слоях GaN. Первый заключается в преднамеренной компенсации доноров акцепторами (углеродом или железом) [75, 76]. В работе [76] сообщается о технической возможности использования в технологии МОСГФЭ пропана для легирования слоёв GaN углеродом, однако авторы работы установили негативное влияние пропана на структурное качество слоёв на начальных этапах роста. При легировании буферных слоев GaN железом наблюдается «эффект памяти» [77], что может приводить к непреднамеренному легированию всех слоёв гетероструктуры, включая область с 2DEG. Второй, часто реализуемый в технологии газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений,

основан на преднамеренном снижении структурного совершенства начальных буферных слоёв GaN, в результате которого происходит увеличение количества краевых дислокаций в слоях GaN. Это приводит к возрастанию числа глубоких акцепторных уровней [78], на которые происходит захват электронов с донорных уровней. Целенаправленное снижение структурного совершенства буферных слоёв GaN является противоречивым способом решения проблемы, поскольку повышение плотности дислокаций неизбежно ведет к ухудшению электрофизических параметров двумерного электронного газа. В ряде работ сообщается о возможности управления фоновым легированием за счет влияния на встраивание углерода [15] и кислорода [16] путём изменения ростовых условий. Из вышесказанного следует, что получение высокоомных слоёв GaN является ещё одной важной задачей при росте гетероструктур для GaN транзисторов.

Цель диссертационной работы заключалась в разработке физических основ аммиачной молекулярно-лучевой эпитаксии свободных от трещин слоёв GaN-на-Si для транзисторов с высокой подвижностью электронов, включающую в себя технологию роста структурно совершенного активного слоя GaN с гладкой морфологией поверхности.

Глава 2 Аммиачная молекулярно-лучевая эпитаксия A_3 -нитридов

2.1 Особенности установки аммиачной молекулярно-лучевой эпитаксии Riber Compact-21N

Возможность получения методом МВЕ монокристаллических слоёв высокой чистоты с контролируемой толщиной, позволяет выращивать гетероструктуры с тонкими (единицы нм) слоями различного состава. Метод МВЕ позволяет синтезировать структуры с заданными внутренними напряжениями сжатия или растяжения, которые локально модифицируют зонную диаграмму, что является особенно важным при росте структур GaN с двумерным электронным газом. Особенность плазменной МВЕ в сравнении с аммиачной МВЕ заключается в необходимости роста слоев в небольшом избытке по галлию (около 2-ух монослоёв), что может приводить к образованию дефектов в слоях GaN в виде галлиевых капель, при этом рост в условиях обогащения по азоту сопровождается радикальным огрублением морфологии поверхности слоев [79, 80]. Технология МОСГФЭ отличается от МВЕ высокими ростовыми температурами (более 1000 °С), столь высокие ростовые температуры приводят к большему перемешиванию слоев вблизи гетерограниц и, соответственно, осложняет процесс формирования резких гетерограниц в транзисторных ГЭС [81, 82].

Рост A_3 -нитридных гетероструктур производился на специализированной установке NH_3 -МВЕ французской фирмы Riber Compact-21N. В качестве источника активного азота в установке используется аммиак особой чистоты 99,9999% (производства фирмы «Хорст», Москва). Дополнительная очистка аммиака от присутствующих в газе частиц осуществляется фильтрами Entegris со степенью очистки 99,999999% для частиц размером более 0,01 мкм, в состав которых входит гидрофобная политетрафторэтиленовая мембрана. Регулировка потока NH_3 в камеру осуществляется программируемым регулятором потока фирмы Bronkhorst,

работающим в диапазоне от 0 до 400 норм. см³/мин. В качестве источников алюминия используются эффузионные ячейки, специально сконструированные российской фирмой ЗАО «НТО» для предотвращения «creeping»-эффекта в атмосфере остаточного аммиака. Молекулярные испарительные источники алюминия с отрицательным градиентом температуры к выходной апертуре тигля используются в комплекте с тиглями из пиролитического нитрида бора (PBN) с расширяющимся раструбом.

Система откачки ростовых камер установок NH₃-МВЕ отличается от классических установок молекулярно-лучевой эпитаксии, оснащенных магниторазрядными насосами. Из-за наличия аммиачного газового инжектора в качестве источника азота, откачка ростовой камеры осуществляется посредством высокопроизводительного турбомолекулярного насоса (скорость откачки более 2000 литров в секунду), на выходе которого располагается форвакуумный насос высокой производительности (скорость откачки более 80 литров в час). В случае использования во второй ступени откачки пластинчато-роторного масляного насоса, для его заливки применяются тяжёлые масла с низким давлением паров и высокой химической инертностью типа Fomblin или Krytox на основе смеси фторированных полимеров, полученных фотохимическим процессом из гексафторпропилена. Современные исследовательские установки оборудуются форвакуумными безмасляными винтовыми или спиральными насосами, вакуумные уплотнения которых не подвергаются коррозии при контакте с аммиаком.

Известно, что в методе NH₃-МВЕ существует проблема эксплуатации твердотельных источников металлов III-группы. Алюминий в атмосфере аммиака смачивает стенки тигля из пиролитического нитрида бора (PBN). В результате смачивания шихтовой материал покидает горячую зону тигля и оказывается на внешней части тигля и арматуре нагревателя (см. рисунок 9). Попадая на разогретую арматуру нагревателя, жидкий металл вызывает его коррозию и, как следствие, разрушение. Это приводит к быстрому выходу из строя молекулярного источника.

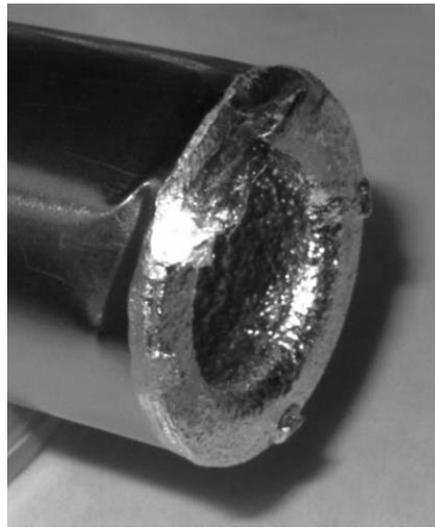


Рисунок 9 – «Creeping»-эффект в атмосфере остаточного аммиака

Для предотвращения вытекания Al из тигля возможно использование специальной конструкции Al источников с отрицательным градиентом температуры к апертуре тигля («cold lips»). В источниках данной конструкции происходит снижение потока шихтового материала из горячей нижней зоны тигля. Это позволяет предотвратить вытекание металла из тигля, при условии, что при рабочей температуре источника температура верхней части тигля опускается ниже точки плавления алюминия. Однако при использовании такой конструкции источника возникает другая проблема, связанная с накоплением Al в холодной верхней части тигля, что весьма быстро приводит к его зарастанию, и, как следствие, уменьшению потока от роста к росту. В свою очередь, это существенно осложняет контроль параметров роста.

Снизить эффект зарастания тигля возможно, используя два источника Al при пониженных температурах. Низкие температуры приводят к снижению переноса металла из горячей зоны в холодную и уменьшают скорость зарастания тигля. Однако при таком решении максимальная скорость испарения Al является технологически неприемлемой для роста слоёв Al(Ga)N с высоким содержанием Al.

В ЗАО «НТО» г. Санкт-Петербург был разработан молекулярный источник Al НЛАС53.157.000, имеющий специальную форму тигля, предназначенный для NH₃-МВЕ и позволяющий достигать высоких скоростей

роста (0,4 мкм/ч) слоёв AlN. Конструкция источника обеспечивает отрицательный градиент температуры к раструбу тигля, что обеспечивается конструктивными решениями выполненного нагревателя и способствует охлаждению раструба. Металл, вытекая из тела тигля, замерзает на холодном раструбе, но процесса сужения эффективного диаметра тигля не происходит из-за того, что весь замерзший металл скапливается на стенках расширяющегося раструба (см. рисунок 10).

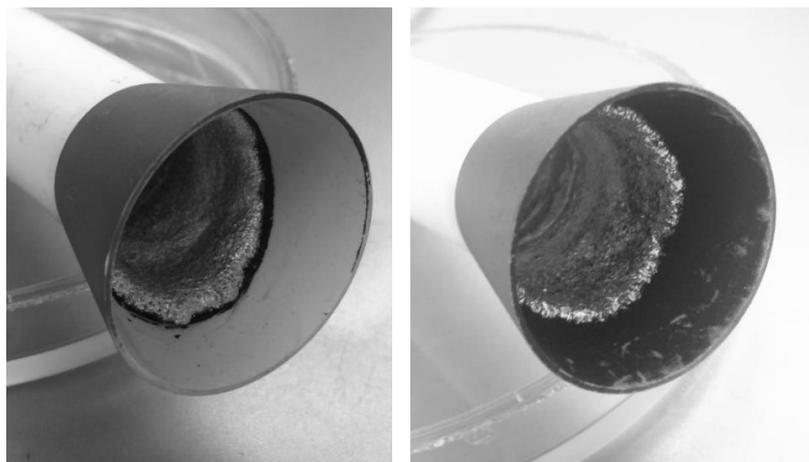


Рисунок 10 – Вытекание Al в атмосфере остаточного аммиака в тиглях с расширяющимся раструбом

Проблема, связанная с вытеканием металла из тигля, также касается и источников Ga. Для предотвращения вытекания Ga из тигля, обычно используют специальные двухзонные источники с положительным градиентом температуры к апертуре тигля («hot lips»). Идея решения проблемы в таких источниках заключается в испарении всего материала с верхней части тигля, что и препятствует его вытеканию. Однако конструкции двухзонных источников с горячей верхней зоной, хотя и предотвращают процесс вытекания металла из тигля, не позволяют избежать распределения металла по телу тигля выполненного из пиролитического нитрида бора. Рост слоёв AlGa_xN различных составов требует разного соотношения потоков элементов третьей и пятой групп таблицы Менделеева, что приводит к использованию разных потоков аммиака во время роста и, как следствие, приводит к разному фоновому давлению в камере. Периодические изменения

фоновое давления приводят к непрерывному перераспределению Ga внутри тигля между двумя зонами. В результате пропадает стабильность работы источника от роста к росту, появляется необходимость выполнять дополнительные калибровки после каждого слоя, что технологически неприемлемо во время роста приборных структур.

Разработанные фирмой Riber галлиевые источники серии MS Technology предназначены специально для NH_3 -MBE. Такие источники галлия представляют из себя двухзонные эффузионные ячейки с положительным градиентом температуры к апертуре тигля. Источники укомплектованы тиглями типа «SUMO» из пиролитического графита (PG), внешний вид которых приведён на рисунке 11. Основная конструктивная особенность таких источников заключается в использовании в качестве материала тигля не классического для MBE - PBN, а PG, который, в отличие от PBN, не смачивается галлием в атмосфере аммиака. Использование в качестве материала тигля PG приводит к полному исключению вытекания металла из тигля, как следствие Ga зеркало на поверхности расплавленного в тигле металла остаётся неизменным почти до полной выработки материала. Данный эффект существенно стабилизирует поток материала из источника на протяжении всего цикла работы от загрузки до перегрузки шихтового материала.

PG тигель представляет собой разборную конструкцию типа SUMO. Такая конструкция используется с двухзонным источником с двумя нитями накала, приспособленным для тигля уникальной формы. Галлиевый источник работает в режиме с горячих губок тигля, чтобы исключить повторную конденсацию материала в отверстии тигля и тем самым уменьшить овальные дефекты. Теплозащитный колпачок повышает эффективность источника и сводит к минимуму тепловую нагрузку на систему. Источник SUMO обеспечивает превосходную стабильность и однородность потока, а также значительно увеличенную емкость загрузки шихтового материала.

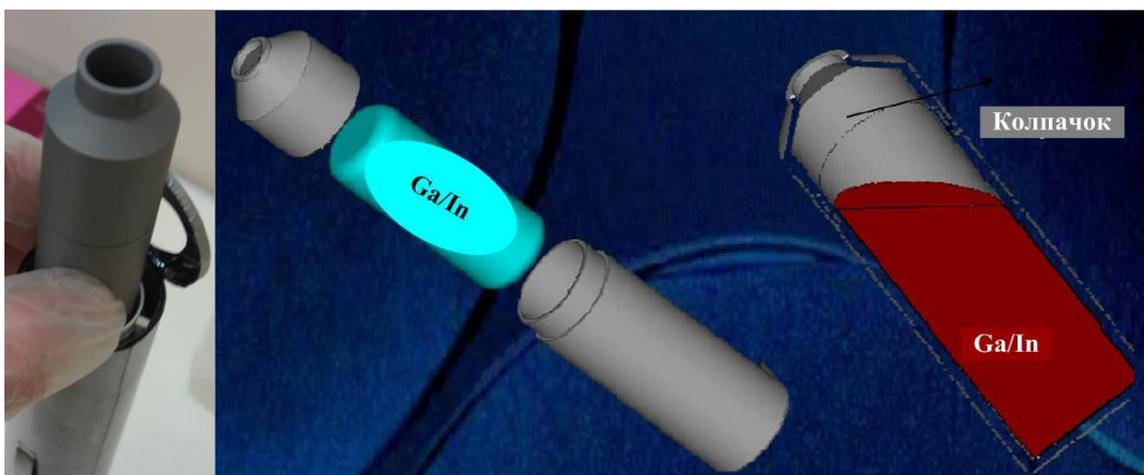


Рисунок 11 – Тигель из пиролитического графита для галлиевого источника
Riber MS Technology

Для определения абсолютных ростовых температур в установках NH_3 -MBE используется оригинальная методика, основанная на измерении спектров свечения нагретых подложек. Методике измерения температуры посвящён отдельный раздел диссертации. Контроль остаточной атмосферы в ростовых камерах обеспечивается вакуумным масс-спектрометром RGA-200. Все установки MBE оборудуются системами ДБЭО, где тестирующий электронный пучок направляется на образец под малыми скользящими углами ($1-3^\circ$). Метод ДБЭО широко используется в технологии молекулярно-лучевой эпитаксии, как один из основных инструментов для оперативного контроля очистки поверхности, определения кристаллической структуры и оценки морфологии поверхности, исследования поверхностных реконструкций и кинетики ростовых процессов, процессов формирования квантовых точек, а также определения скорости роста и толщин слоев, состава твердых растворов и прочее. Важно отметить техническое преимущество для этих целей геометрии ДБЭО в сравнении с дифракцией медленных электронов, которое заключается в том, что дифрактометр не мешает наиболее целесообразному расположению молекулярных (ростовых) источников. В ростовых установках MBE образец крепится на манипуляторе, который позволяет вращать образец вокруг оси нормальной к поверхности

(азимутальное вращение) и вокруг оси лежащей в плоскости поверхности (изменение скользящего угла падения), а также осуществлять перемещения образца по трем декартовым координатам. В используемой установке манипулятор обладает всеми перечисленными степенями свободы.

Используемая в данной работе сверхвысоковакуумная ростовая установка NH₃-MBE Compact-21N оснащена системой ДБЭО, состоящей из электронной пушки с блоком управления фирмы STAIB Instruments (Германия), позволяющей регулировать энергию первичного пучка $E_p = 5-12$ кэВ и люминесцентным экраном с высокой эффективностью катодолюминесценции.

Конденсорная система (электронная оптика) электронной пушки позволяет получать угловую ширину первичного пучка $\sim 1,5$ мрад. Расстояние от места падения электронного пучка на образец до экрана $L = 325$ мм (это важный параметр дифрактометра, называемый длиной камеры). Для нашего дифрактометра с углом расходимости первичного пучка электронов 1,5 мрад пространственное разрешение параллельно краю образца оценивается как ~ 120 Å, а перпендикулярно краю может достигать – 4000 Å.

Эволюция полной дифракционной картины от люминесцентного экрана регистрировалась с помощью системы kSA-400, производства США k-Space Associates Inc., оснащенной камерой на основе ПЗС и программным обеспечением для регистрации и анализа дифракционных картин. Программное обеспечение kSA-400 позволяет:

- записывать-хранить-воспроизводить дифракционные фильмы в реальном времени в цифровом формате;
- измерять интенсивность участка ДК, а также зависимости интенсивности выбранного рефлекса или участка ДК от времени;
- анализировать осцилляции дифракционных рефлексов (зеркального и других рефлексов);

- строить и анализировать профили интенсивности выбранного рефлекса вдоль выбранного отрезка на ДК, вычитать фон
- Осуществлять подгонку профилей рефлексов аналитическими функциями, в частности Гауссовым пиком, и затем получать и анализировать зависимости от времени положения, интенсивности или ширины выбранных дифракционных рефлексов;
- производить математическую обработку картин дифракции.

Стандартный нагреватель подложки установок МВЕ выполнен в виде фигурной металлической ленты из тантала, уложенной в форму-держатель из PBN и питаемый лабораторным источником мощностью 1,6 кВт. При взаимодействии разогретой металлической спирали нагревателя с аммиаком и продуктами его разложения, присутствующими в ростовой камере, происходит постепенное «выгорание» ленты, и, в последующем, выход нагревателя из строя (см. рисунок 12). При росте A_3 -нитридов требуется поддерживать высокую температуру подложки, т.е. подавать высокие мощности нагрева, и, таким образом, важно обеспечивать длительную безотказную работу нагревателя. Исключить регулярные поломки нагревателя при росте A_3 -нитридов, приводящие к необходимости частых вскрытий установки с целью замены спирали нагревателя подложек, стало возможным благодаря применению альтернативного нагревателя, разработанного фирмой Riber специально для NH_3 -МВЕ (см. рисунок 13).

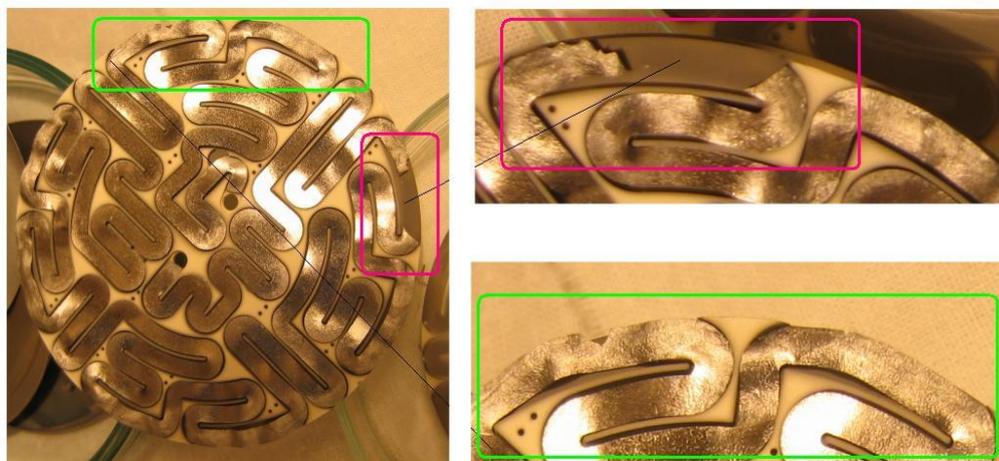


Рисунок 12 – Фотографии перегоревшей спирали в форме-держателе из PBN

Принципиальное отличие данного нагревателя от стандартного нагревателя с танталовой спиралью заключается в использовании в его конструкции спирали из пиролитического графита (PG). Такой нагревательный элемент является абсолютно устойчивым к агрессивной атмосфере аммиака в ростовой камере. Сопротивление спирали из PG при комнатной температуре составляет около одного Ома. Таким образом, при токе ~ 30 А и напряжении порядка 100 В нагреватель со спиралью из PG способен обеспечивать ростовую температуру около 1500 °С.



Рисунок 13 – Фотография нагревательного узла установки NH_3 -МВЕ Compact-21N

2.2 Контроль температуры на поверхности подложек и измерение скорости роста Al_3 -нитридных слоёв

Нагрев подложек при NH_3 -МВЕ нитридных структур производится посредством бесконтактного радиационного нагрева. В штатной конструкции установок МВЕ термопара, изготовленная на основе сплава металлов W-Re, которая является частью конструкции нагревателя, располагается с противоположной стороны образца относительно спирали нагревателя. Таким образом, измеряемая термопарой температура значительно (до 100 °С) отличается от температуры на поверхности образца, и меняется от роста к

росту в зависимости от степени запылённости держателя и типа обработки обратной стороны подложки. Помимо термопары установки NH₃-МВЕ, как правило, оборудованы одноцветными пирометрами интенсивности. Было обнаружено, что по мере запыления смотрового окна, показания пирометра интенсивности изменяются от роста к росту при неизменной мощности, потребляемой нагревателем. При этом изменения оптических свойств поверхности неочевидны, а истинная температура неизвестна.

Для определения истинной температуры подложки было предложено измерять спектры свечения нагретой подложки. Спектры свечения нагретых до различных температур подложек измерялись при помощи спектрометра Ocean Optics USB4000. Излучение регистрировалось спектрометром через световод с коллиматором Thorlabs, использовавшимся в качестве входного объектива. Коллиматор крепился на одном из смотровых портов камеры МВЕ, расстояние до подложки составляло около 65 см. Спектральный диапазон измерения составлял 448–1135 нм. Измерения проводились в процессе

вращения подложки. Для исключения влияния вращения на результат измерения производилось накопление результатов в течение 12 с, что соответствует двум полным оборотам подложки. Каждое измерение спектра разогретой подложки сопровождалось измерением темнового спектра, который в процессе обработки данных вычитался из спектра свечения подложки с целью минимизации ошибки при дальнейшей аппроксимации спектра. Суть используемого метода контроля температуры сводится к записи спектра от нагретого образца с помощью оптического спектрометра Ocean Optics (рабочий диапазон длин волн 450-1100 нм) и дальнейшей аппроксимации полученного спектра с использованием фундаментального закона Планка:

$$u(\lambda, T) = \frac{16 \cdot \pi^2 \cdot \hbar c^2}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{\exp\left(\frac{2 \cdot \pi \cdot \hbar c}{\lambda k_B T}\right) - 1}$$

Собранная оптическая система состоит из спектрометра, волоконного световода, коллиматора с кинематическим держателем, который закрепляется на технологическое окно установки МВЕ, расположенное напротив нагревателя (см. рисунок 14).

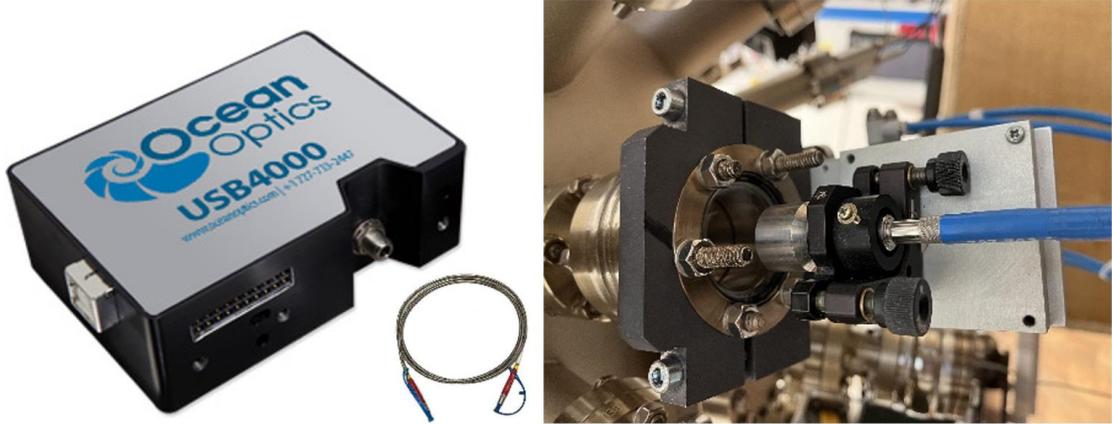


Рисунок 14 – Спектрометр Ocean Optics, волоконный волновод, коллиматор с кинематическим держателем

На рисунке 15 приведены спектры излучения абсолютно черного тела при нескольких температурах, рассчитанные для потока фотонов в единичный интервал длин волн в линейном и в логарифмическом масштабах. Красной пунктирной линией обозначена область диапазона длин волн, которую регистрирует спектрометр.

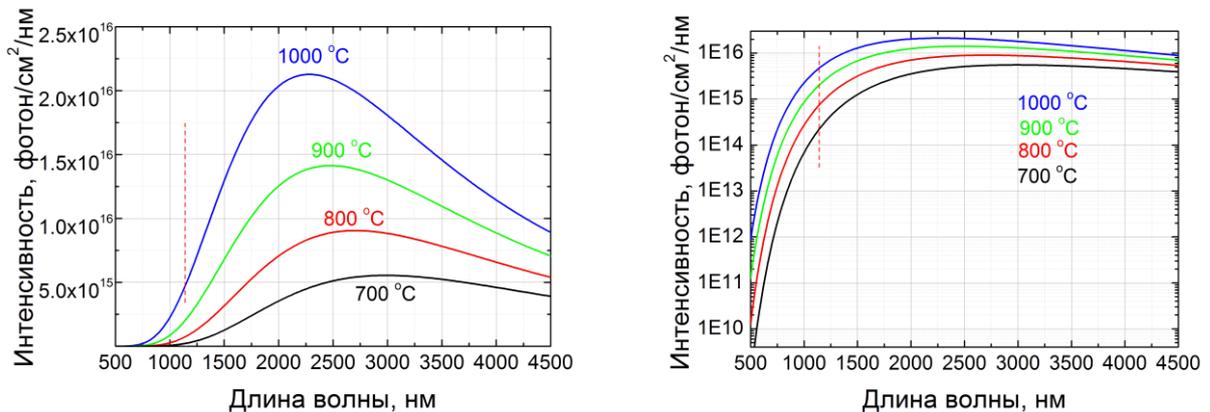


Рисунок 15 – Расчитанные спектры излучения абсолютно черного тела при нескольких температурах: *слева* – в линейном масштабе, *справа* – в логорифмическом масштабе

Для определения истинной температуры дополнительно был измерен спектр лампы с известной цветовой температурой из комплекта спектрометра ДФС-52, являющейся аналогом абсолютно чёрного тела. Спектры свечения подложек калибровались с помощью нормировочного спектра системы регистрации, вычисленного на основании измерения спектра лампы (см. рисунок 16).

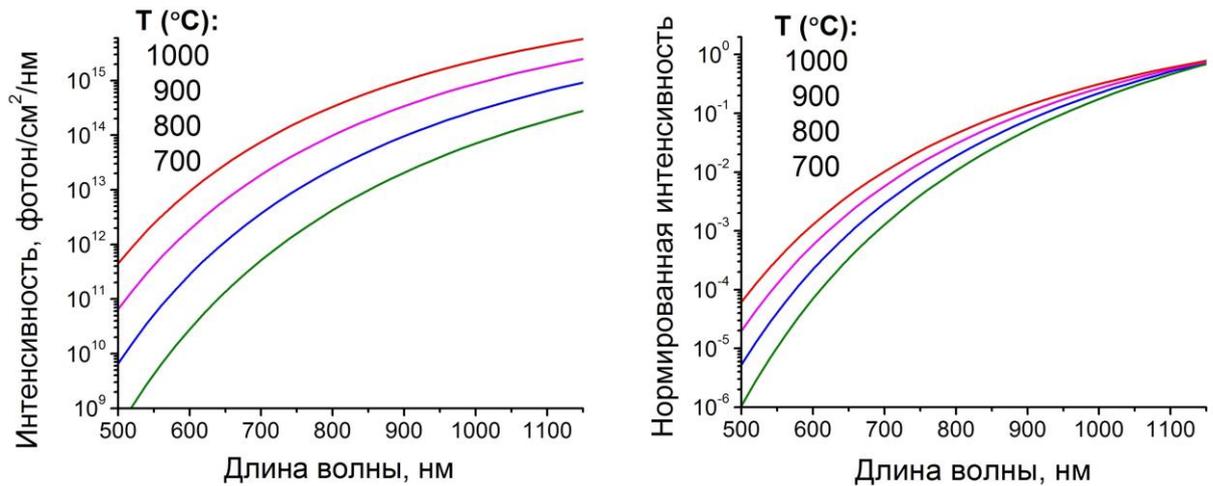


Рисунок 16 – Спектры излучения абсолютно черного тела при температурах 700–1000 °С, рассчитанные для потока фотонов в единичный интервал длин волн: *слева* – в абсолютных единицах, *справа* – нормированные на значение на правом краю диапазона

Нормированные спектры наглядно демонстрируют изменение формы спектра (а значит и различие в соотношении двух точек на спектрах, соответствующих разным длинам волн) для различных температур. Пример исходного и нормированного спектров свечения шлифованной с обратной стороны подложки сапфира при наивысшей температуре 1000 °С (см. рисунок 17). Из рисунка 17 видно, что имеющийся нормировочный спектр компенсирует неоднородности пропускания и чувствительность элементов системы регистрации. При этом, однако, в области спектра до 900 нм коррективы примерно постоянна и значительно меньше, чем при больших длинах волн. Неоднородности пропускания и чувствительность элементов системы регистрации обусловлены чувствительностями фотодектора

спектрометра, дифракционной решётки, поглощением световода SiO_x (плавленый кварц) в области длин волн около 940 нм, связанных с наличием химически несвязанных групп ОН. При подгонке измеренного спектра по формуле Планка использовались логарифмированные спектры с целью минимизации статистической ошибки. Алгоритм измерения температуры на поверхности образца с помощью предложенного метода включает в себя следующие операции:

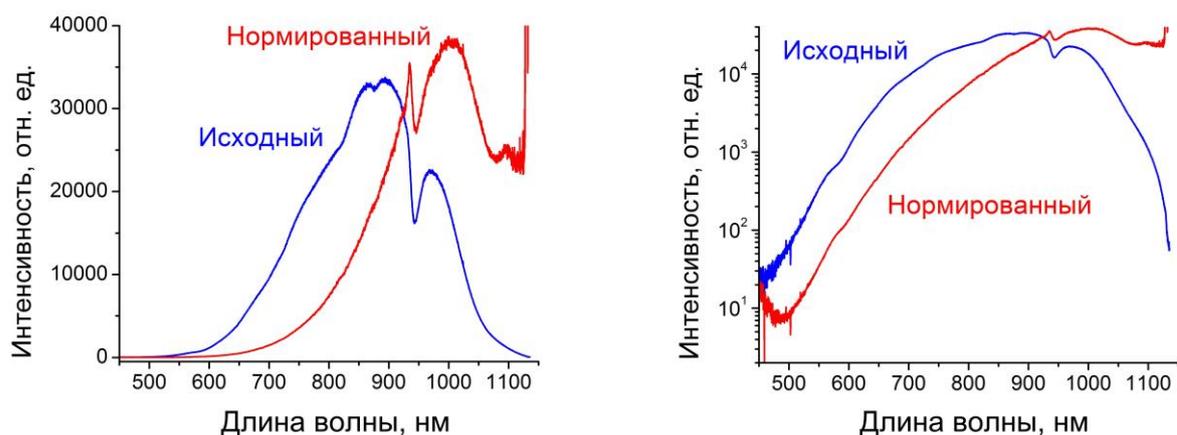


Рисунок 17 – Исходный и нормированный на чувствительность оптической системы спектры свечения подложки кремния при температуре 1000 °С: *слева* – в линейном масштабе, *справа* – в логорифмическом масштабе

запись спектра от нагретого образца; запись темнового спектра; вычитание из спектра нагретого образца темнового спектра; нормировка полученного после вычитания темнового спектра на чувствительность системы; переход в логарифмический масштаб по шкале интенсивности; вычисление температуры на поверхности образца путём подгонки рассчитанного по формуле Планка спектра абсолютно чёрного тела. Результаты всех описанных выше операций приведены на рисунке 18.

Предложенный способ контроля температуры, позволил достоверно определять температуру на поверхности образцов во время роста с точностью ± 5 °С, связанную с точностью аппроксимации спектра и с точностью калибровки цветовой температуры лампы. Используемый контроль

температуры устранил проблемы её определения для различных материалов подложки, типов обработки их обратных поверхностей и напыляемых на обратную сторону металлов.

Установки NH_3 -МВЕ, как правило, оборудованы лазерным интерферометрическим рефлектометром, обеспечивающим контроль средней скорости роста эпитаксиальных слоев. В отличие от As-МВЕ, где контроль скорости роста осуществляется путём измерения осцилляций интенсивности зеркального рефлекса с использованием метода ДБЭО, при эпитаксии $\text{A}_3\text{-N}$ применяется именно лазерная рефлектометрия, поскольку более высокие температуры роста $\text{A}_3\text{-N}$ приводят к отсутствию на поверхности классической двумерной моды роста, характеризующейся периодическим двумерно-островковым зародышеобразованием очередного монослоя с последующим его разрастанием до полного монослоя. Такая периодическая смена гладкости-шероховатости поверхности, является необходимой последовательностью событий на ростовой поверхности для реализации возможности успешного наблюдения осцилляций дифракционных рефлексов, в том числе и зеркального рефлекса, в ДБЭО.

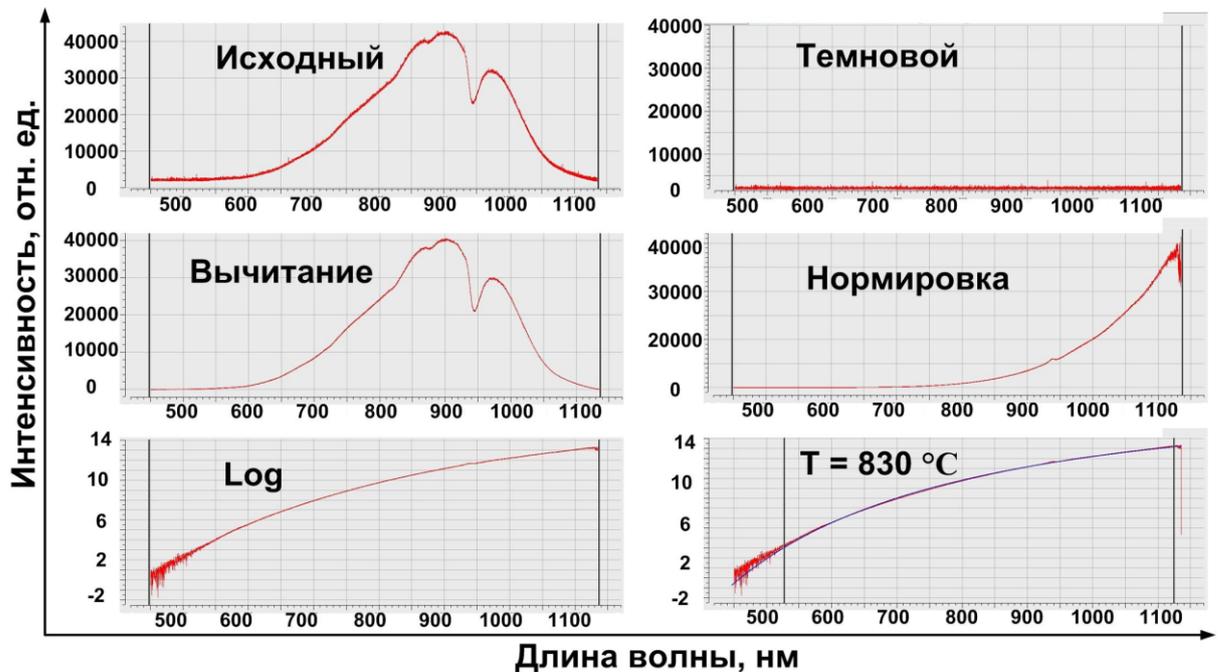


Рисунок 18 – Иллюстрация алгоритма определения температуры на поверхности образца с помощью спектрометра Ocean Optics USB4000

Лазерная интерферометрия имеет широкое применение в технологии эпитаксиальных пленок и служит для контроля толщины растущего слоя в режиме реального времени. Принцип работы лазерного интерферометра основан на эффекте интерференции лазерного луча при отражении от поверхностей раздела сред с сильно отличающимися показателями преломления. В случае NH_3 -МВЕ нитридов третьей группы на сапфире интерферируют лучи, отраженные от поверхности растущего слоя, соприкасающейся с вакуумом ($n = 1$), и от интерфейса нитридная пленка ($n \approx 2,1 \dots 2,5$)/подложка кремния ($n \approx 3,4$) (см. рисунок 19).

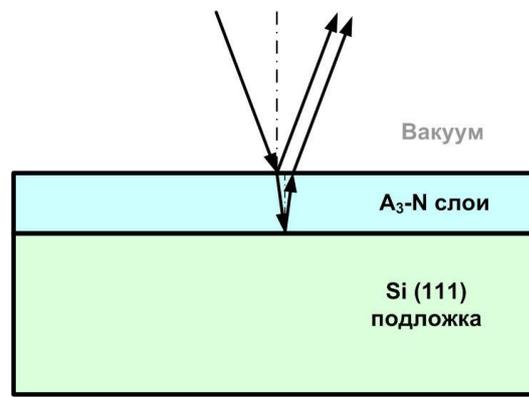


Рисунок 19 – Схема интерференции в системе $\text{A}_3\text{-N/Si}$

При этом длина волны лазера должна быть такой, чтобы коэффициент пропускания в материале пленки был не менее 70-80%. В случае роста нитридов третьей группы чаще всего используют лазеры видимого диапазона. При углах падения/отражения, близких к нормальному (в случае отклонения падающего и отражённого лучей от нормали вводится поправочный коэффициент, определяемый углом отклонения от нормали), период осцилляций на интерференционной картине соответствует увеличению толщины пленки на величину равную половине длины волны источника света в материале $\lambda/2n$. Для используемого твёрдотельного лазера ($\lambda = 532 \text{ нм}$) и пленки GaN ($n \approx 2,38$) период составляет $\approx 132 \text{ нм}$. Толщины отдельных слоев и общая толщина структуры определяются по числу экстремумов графика с учетом соотношения $h \approx \lambda/2n$, а скорость роста – по формуле

$V_{\text{роста}}(\text{нм/ч}) = 132 \times 3600 / \Delta t$, где Δt - время роста в секундах, соответствующее одному периоду на интерферограмме. При двумерной моде роста, затуханий осцилляций практически не происходит (или затухание находится на уровне не более 5-10% от амплитуды), продолжительность процесса регистрации не имеет принципиальных ограничений по времени.

На рисунке 20 показан пример осцилляций интенсивности отраженного от образца света ($\lambda=532$ нм), зарегистрированных во время роста слоя GaN. Использование рефлектометра позволяет контролировать ростовые параметры непосредственно в процессе роста: скорость роста и толщины слоев, а также позволяет определять состав твердых растворов AlGaN.

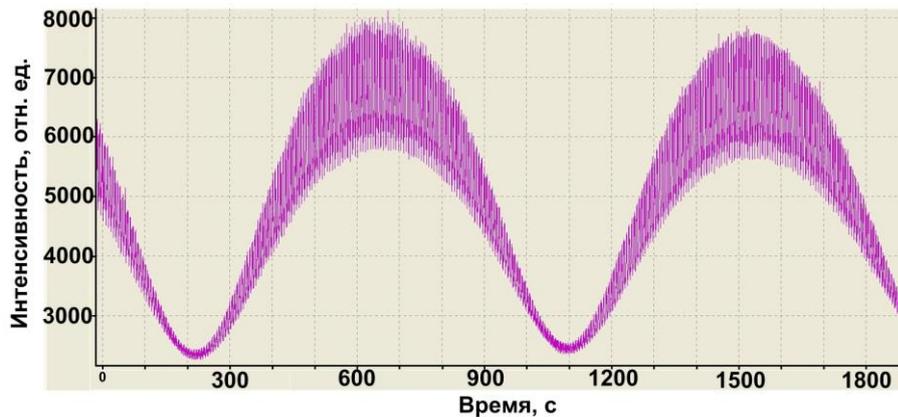


Рисунок 20 – Типичные осцилляции интенсивности отраженного света в процессе роста пленки GaN на кремнии

В главе 2 перечислены особенности конструкций испарительных источников, нагревательных элементов, описаны методы контроля температуры на поверхности растущей плёнки и способы измерения скорости роста, которые дают представление о технических отличиях NH_3 -МВЕ от классической МВЕ.

2.3 Характеристики оборудования используемого для характеристики Al_3 -нитридных ГЭС физическими методами исследования твёрдого тела

Для характеристики морфологии исследуемых слоёв в работе использовался АСМ «Integra Aura» фирмы NT-MDT (вертикальное

разрешение — лучше 0,08 нм). Измерения проводились в режиме полуконтактного зондирования.

Контроль поверхности слоёв GaN-на-Si на предмет наличия трещин осуществлялся с помощью оптического микроскопа Olympus BX53. Оптимальным режимом съёмки для выявления подобного рода макродефектов на поверхности является тёмнопольный режим съёмки. При таком режиме центральная часть первичного пучка вырезается непрозрачным пятном в оптическом канале и в объективе коаксиально (так как у объектива есть фокус) проходит полый конус света. Этот свет отражается кольцевым зеркалом и направляется на образец под малым углом, создавая эффект косоого освещения. Отраженный на элементах рельефа свет собирается объективом и направляется на камеру. Благодаря этому плоская зеркальная пластина дает совершенно темный фон, так как в объектив в этом случае попадает в центр полого (тёмного) конуса, на котором детали рельефа выделяются в виде ярких линий или пятен, поскольку они отклоняются не зеркально и потому попадают в этом случае в полую-тёмную область конуса. Тёмнопольный режим освещения обеспечивает наибольшую чувствительность к круто наклоненным к поверхности деталям рельефа, например, царапинам на поверхности полированных пластин, однако значительно слабее прорисовывает плавно изменяющийся рельеф.

Высокора разрешающая ПЭМ выполнялась на электронном микроскопе TITAN 80-300 (FEI), оборудованном корректором сферической аберрации объективной линзы (Cs) при ускоряющем напряжении 300 кВ. Для ПЭМ исследований образцы препарировались в виде поперечных срезов по плоскости (110) кремния с использованием оптимизированной методики, включающей шлифовку, полировку и малоугловое ионное травление (Ar^+) при энергиях ионного пучка 1 кэВ на заключительной стадии утонения. Цифровая обработка экспериментальных ПЭМ изображений высокого разрешения, включающая корректировку увеличения и пространственную Фурье фильтрацию проводилась с использованием коммерческого пакета

программ GMS-2.32 (GATAN). Сканирующая электронная микроскопия выполнена на микроскопе Hitachi SU8220 в режиме вторичной электронной эмиссии. Сколы образцов предварительно шлифовались и полировались.

При исследовании нитридных плёнок методом КРС использовался спектрометр комбинационного рассеяния света T64000 (Horiba Jobin Yvon) с охлаждаемым жидким азотом матричным ПЗС-детектором и микроамановской установкой на базе оптического микроскопа BX41 (Olympus, Япония). Спектральное разрешение составляло не хуже 2 см^{-1} . Образцы возбуждались линией аргонового лазера с длиной волны 514,5 нм. Лазерное излучение было линейно поляризовано, поляризация рассеянного света не анализировалась. Для подавления процесса локального разогрева плёнок при записи спектров, пятно лазера было расфокусировано, диаметр пятна составлял около 10 мкм, при этом мощность лазера, достигающая образца, составляла 1 мВт.

Рентгеновские кривые качания регистрировались на двухкристальном дифрактометре ДСО-1Т методом трехосевой рентгеновской дифрактометрии в излучении $\text{Cu}_{K\alpha 1}$ ($\lambda = 1,54056 \text{ \AA}$), с использованием монохроматора Ge(004). Первоначально плоскость подложки устанавливалась параллельно рентгеновскому пучку, затем методом симметричного сканирования находили углы возможных дифракционных отражений (ω -scan). Сканирование ω - 2θ для симметричного рефлекса (0002) пленок эквивалентно сканированию в обратном пространстве вдоль оси OZ нормальной к поверхности образца. Вдоль этого направления располагаются узлы обратной решетки от пленок с различными параметрами. Результатом такого сканирования является кривая дифракционного отражения, пики на которой не содержат вклад ориентационных искажений. Таким образом, метод трехосевой рентгеновской дифрактометрии позволяет зарегистрировать рефлексы от структуры с близкими параметрами пленок, имеющие однако искажения, например, в результате пластической релаксации напряжений.

Образцы SiN, формирующегося на поверхности кремниевой подложки в процессе нитридации для исследований методом сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) были приготовлены на проводящей подложке Si(111) n-типа проводимости с удельным сопротивлением $0,3 \text{ Ом}\times\text{см}$ в сверхвысоковакуумной машине (Omicron, Германия). Данное оборудование совмещает в себе сканирующий туннельный микроскоп систему дифракции высокоэнергетических электронов на отражение машина и оснащена узлом подачи сверхчистого аммиака. Подготовка чистой поверхности кремния для экспериментов проводилась в два этапа. Атомная чистота поверхности Si достигалась с помощью высокотемпературного отжига ($1250 \text{ }^\circ\text{C}$) в подтверждалась регистрацией сверхструктуры (7×7). Изображения СТМ регистрировались при комнатной температуре в режиме обратной связи по постоянному туннельному току, а также в режиме туннельной спектроскопии с визуализацией тока с использованием электрохимически заостренного вольфрамового наконечника. Типичные токи не превышали $0,1 \text{ нА}$ (типичный используемый туннельный ток составлял $0,025 \text{ нА}$), а напряжение смещения (V_{bias}) относительно потенциала зонда подаваемое на образец варьировалось в диапазоне $\pm 5 \text{ В}$. Зависимость дифференциальной проводимости $(dI/dV_{\text{bias}})/(I/V_{\text{bias}})$ от напряжения в туннельном зазоре (V_{bias}) определялась путем численного дифференцирования измеренных ВАХ.

Измерение стационарных спектров фотолюминесценции выполненные при сравнении ГЭС GaN-на-Si и GaN-на- Al_2O_3 проводились с использованием спектрометра Acton SP2500i (Princeton Instruments, США), выполненного по схеме Черни-Тернера, с матричным ПЗС детектором Spec-10 (Princeton Instruments, США), охлаждаемым жидким азотом. Спектры фотолюминесценции нормировались на спектральную чувствительность оптической системы. При измерении стационарных спектров фотолюминесценции возбуждение производилось излучением четвертой гармоники непрерывного Nd:YVO₄ лазера с энергией фотона 4.66 эВ (лазер

МОЦАРТ-532-5W-s с дополнительным резонансным удвоителем частоты FD-SF-07 (ЗАО "Техноскан – Лазерные системы", Новосибирск, Россия). Стабилизация температуры охлаждающей жидкости лазера производилась с использованием чиллера CFC-230-TE-FIC (ООО НПО "КРИСТАЛЛ", Россия). Мощность возбуждающего излучения на образце составляла 14 мВт, диаметр лазерного пятна на образце – 0,5 мм. Для измерения мощности возбуждающего излучения использовался измеритель мощности Thorlabs PM100D с кремниевым фотодиодным сенсором S120VC. Для варьирования мощности возбуждающего излучения на образце использовался комплект нейтральных светофильтров.

Глава 3 Рост слоёв GaN на кремниевых подложках для приборных применений методом аммиачной молекулярно-лучевой эпитаксии

3.1 Морфология поверхности слоев GaN выращиваемых методом аммиачной МВЕ

Исследование влияния условий роста на морфологию поверхности слоёв GaN выполнялось на подложках сапфира. Цель исследований заключалась в поиске ростовых условий, приводящих к формированию наиболее гладкой морфологии поверхности слоёв GaN, поскольку гладкая морфология поверхности является необходимым критерием создания резкой гетерограницы между активным и барьерным слоями транзисторной ГЭС.

Перед ростовыми экспериментами подложки сапфира проходили очистку от поверхностных загрязнений путём высокотемпературного отжига в загрузочной камере при температуре 900 °С в течение одного часа. Затем подложки сапфира экспонировались в потоке аммиака (нитридизовались) 25 норм. см³/мин в течение десяти минут при температуре 840 °С. Данные условия нитридации сапфира способствуют согласованию сапфировой подложки с последующими слоями ГЭС и в дальнейшем приводят к росту AlN металлической полярности. Подробно влияние нитридации на морфологию и структурное совершенство буферных слоёв AlN исследовано в работе [A1]. Далее при температуре 940 °С и потоке аммиака 75 норм. см³/мин выращивался буферный слой AlN толщиной примерно 300 нм. На заключительном этапе поверх буферного слоя AlN выращивались исследуемые слои GaN толщиной 1000 нм. Морфология поверхности слоёв GaN контролировалась методами ДБЭО и АСМ.

Методом ДБЭО было установлено, что при росте GaN при температуре 800 °С и потоке аммиака 200 норм. см³/мин наблюдается двумерная мода роста GaN с характерными для неё дифракционными картинками (ДК) (см. рисунок 21), соответствующими отражательной дифракции. Согласно данным

АСМ, формировалась гладкая (среднеквадратическое значение шероховатости поверхности (RMS ~ 2 нм на площади 5×5 мкм²) поверхность GaN (см. рисунок 21б) со средним размером гексагональных холмов 0,7 мкм. Рост GaN в данных ростовых условиях происходит согласно модели роста кристаллов Бартона–Кабреры–Франка (BCF) [83-85]. BCF модель роста представляет собой частный случай режима течения ступеней, разрастание которых происходит по спиральям, закручивающимся вокруг мест выхода дислокаций.

При снижении температуры роста ниже 775 °С рост GaN характеризуется трёхмерной модой роста, проявляющейся в наблюдении трансмиссионных ДК, при этом на поверхности GaN возникает значительная шероховатость (см. рисунок 21а). Такая морфология (RMS более 60 нм) связана с малой диффузионной длиной адатомов Ga на поверхности растущего слоя, в результате чего реализуется нестабильный послойный рост GaN. Увеличение температуры роста выше 825 °С хотя и характеризуется отражательной ДК, однако данные АСМ указывают на высокую плотность растратов на поверхности выращиваемого слоя GaN (см. рисунок 21в). Подобные растравы, предположительно, обусловлены местами выхода прорастающих дислокаций на поверхность растущего слоя. Дальнейшее повышение температуры роста приводит к переходу в смешанный двумерно-трёхмерный режим роста (см. рисунок 21г), что связано с термическим разложением GaN. Таким образом, был установлен диапазон рабочих температур (775-825 °С) при потоке аммиака 200 норм. см³/мин и потоке Ga $\sim 3,0 \times 10^{-7}$ Торр, характеризующийся двумерной модой роста GaN слоёв и гладкой морфологией поверхности, позволяющей в дальнейшем формировать ГЭС с резкими гетерограницами [А2]. Важно отметить, что данные ростовые условия определяют характер морфологии выращиваемых слоёв GaN вне зависимости от типа исходной подложки, на что указывают данные, опубликованные в работе [А3].

При снижении потока аммиака до 150 норм. см³/мин режим квазитечения ступеней, описываемый в рамках BCF модели не наблюдался.

Нестабильный послойный рост GaN (см. рисунок 21д) с повышением температуры роста сразу переходил в режим, характеризующийся возникновением растратов на поверхности GaN (см. рисунок 21е), а при дальнейшем увеличении температуры начиналось разложение GaN (см. рисунок 21ё,ж).

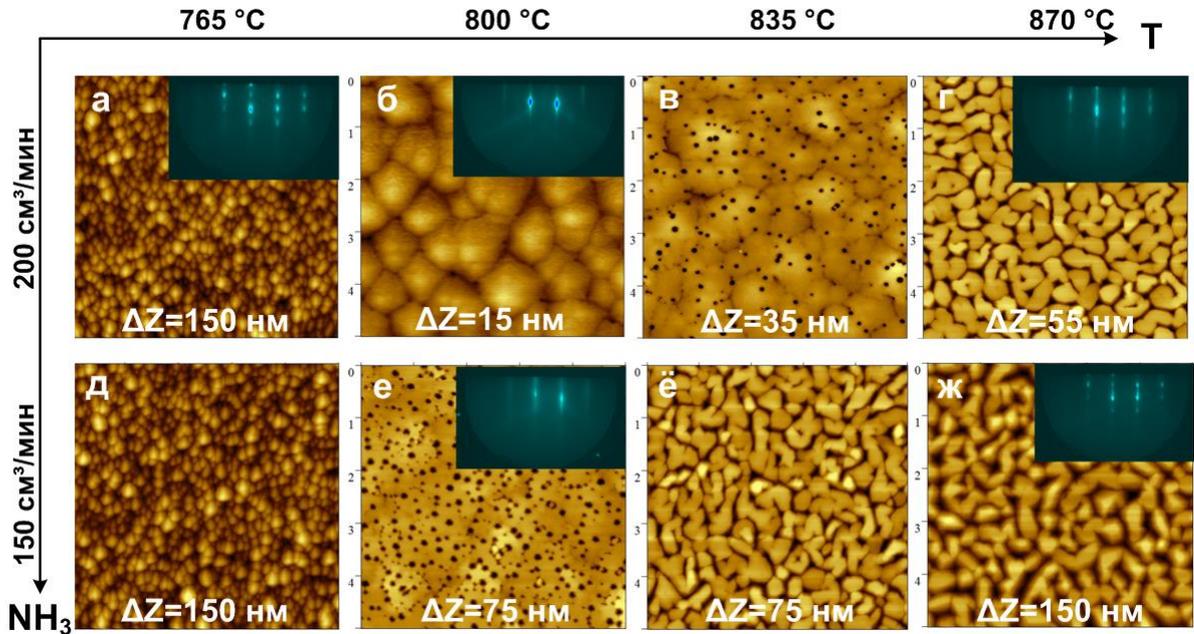


Рисунок 21 – Изображение поверхностей слоёв GaN, полученных с помощью атомно-силового микроскопа размером $5 \times 5 \text{ мкм}^2$, на вставках приведены ДК, полученные от соответствующих поверхностей слоёв GaN

В ходе проведённых исследований была продемонстрирована возможность формирования методом NH_3 -МВЕ слоев GaN с гладкой морфологией поверхности, пригодной для приборных применений.

3.2 Подавление растрескивания слоёв GaN выращиваемых на кремниевых подложках

В рамках отработки технологии роста свободных от трещин слоёв GaN были исследованы две экспериментальные серии образцов GaN-on-Si с одинаковыми конструкциями буферных слоёв, но отличающиеся условиями нитридизации Si. Процесс нитридизации поверхности Si(111) был тщательно исследован ранее в работах [86-90]. Далее в работе были использованы два

типа нитридации: нитридизация 900 °С в потоке аммиака 1 норм. см³/мин в течении 50 с и нитридизация при температуре 700 °С в потоке аммиака 1 норм. см³/мин в течении 100 с. Малый поток аммиака является с технологической точки зрения более приемлемым для контролируемого проведения процесса нитридации поверхности кремния, поскольку образование кристаллического нитрида кремния при потоках аммиака свыше 3 норм. см³/мин происходит значительно быстрее [87, 91], что снижает прецизионность контроля процесса нитридации. Выбор времён процессов нитридации основан на степени завершённости процесса нитридации, определяемого по кинетическим кривым процессов нитридации при разных температурах.

Исследование кинетики процесса нитридации поверхности кремния методом ДБЭО, заключается в записи интенсивности рефлекса 11/8 реконструкции (8×8), образующейся в ходе нитридации кремния с помощью системы записи и анализа дифракционных картин (ДК). Важно отметить, что в процессе нагрева подложки, когда температура превышала 820 °С (температура перехода сверхструктуры (7×7)→(1×1), на ДК наблюдался реконструкционный переход из высокоупорядоченной сверхструктуры (7×7) (см. рисунок 22а) в структуру (1×1) (см. рисунок 22б). Процесс нитридации поверхности кремния (111) инициировался подачей аммиака на поверхность подложки, нагретую до заданной температуры нитридации. При подаче аммиака в камеру роста на дифракционных картинах (см. рисунок 22в,г) наблюдалось появление рефлексов, соответствующих образованию сверхструктуры (8×8), характерной для упорядоченной двумерной кристаллической фазы нитрида кремния, причём образование структуры (8×8) происходит при температурах как ниже, так и выше реконструкционного перехода сверхструктуры кремния (7×7) в (1×1). При продолжении нитридации поверхности кремния интенсивность пятен реконструкции (8×8) на ДК увеличивается, для температур нитридации выше 800 °С со временем наблюдается уменьшение интенсивности всех

пятен на ДК из-за образования аморфной фазы нитрида кремния на поверхности [87].

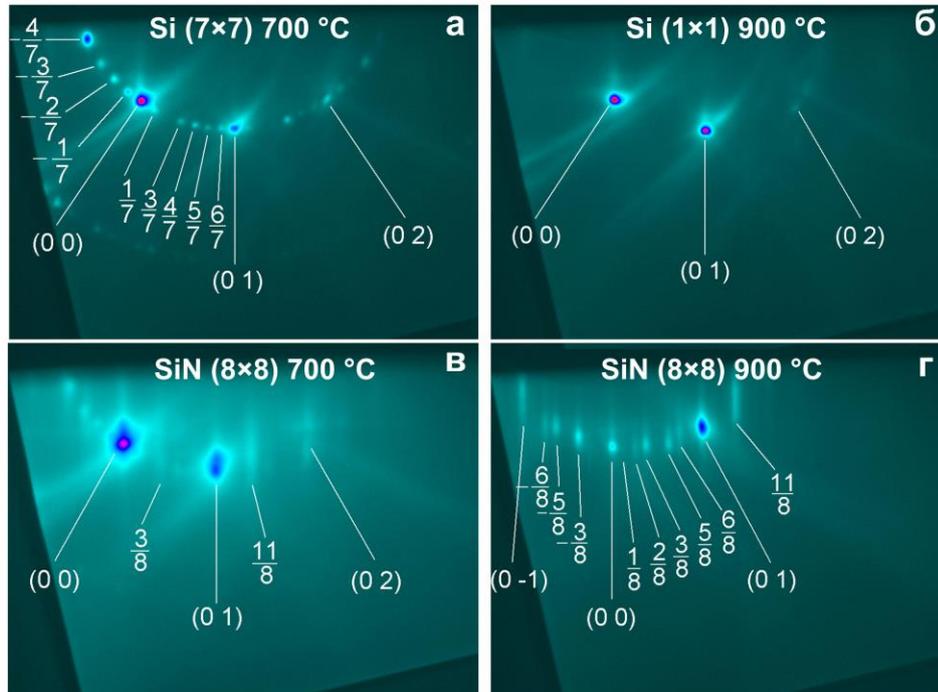


Рисунок 22 – ДК исходной и нитридозованной поверхности кремния: *а* – ДК высокоупорядоченной реконструкции (7×7) на поверхности кремния при температуре подложки 700 °С, *б* – ДК структуры (1×1) на поверхности кремния при температуре подложки 900 °С до начала процесса нитридации, *в, г* – ДК нитрированной поверхности кремния в потоке аммиака 1 норм. см³/мин с реконструкцией (8×8) при температурах 700 °С и 900 °С соответственно

Этот эффект можно объяснить тем, что дифракционная картина формируется в результате интерференции плоских волн, рассеянных от упорядоченного массива поверхностных атомов, тогда как атомы образовавшейся аморфной фазы разупорядочены, что приводит к некогерентному рассеянию электронов в произвольных направлениях, уменьшая интенсивность всех рефлексов на ДК. Временные зависимости интенсивности дифракционных рефлексов, т. е. кинетические кривые нитридации поверхности кремния, строились с использованием системы анализа kSA 400. Выбор рефлекса $11/8$ структуры (8×8) основан на его визуальной яркости по сравнению с другими рефлексами.

На рисунке 23 приведены кинетические кривые процесса нитридации записанные при температурах 700 °С и 900 °С в потоке аммиака 1 норм. см³/мин. Точка ноль по оси абсцисс, соответствует подаче аммиака в ростовую камеру.

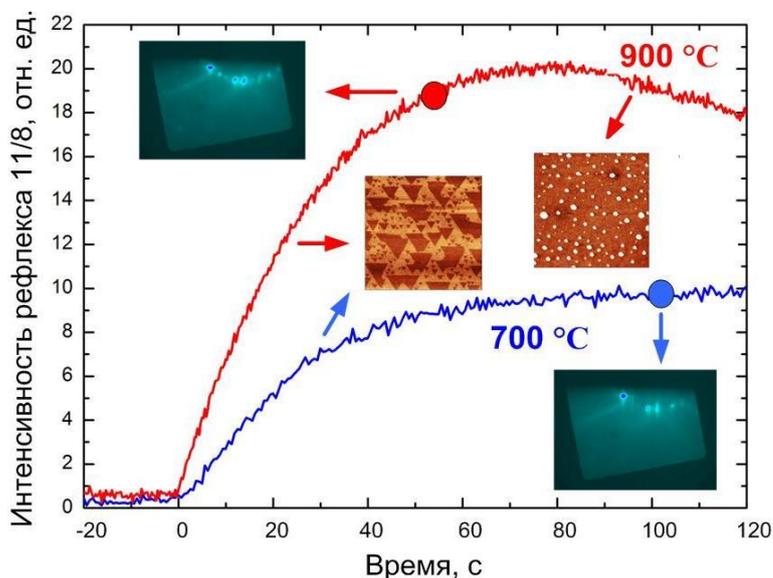


Рисунок 23 – Кинетические кривые процесса нитридации поверхности Si(111) при температурах подложки 700 °С и 900 °С. На вставках в рисунок дифракционные картины реконструкции (8×8) и СТМ изображения кристаллической (8×8) и аморфной фаз SiN

В ходе образования кристаллической фазы SiN наблюдается увеличение интенсивности рефлексов реконструкции (8×8), примеры дифракционных картин формирующихся реконструкций и СТМ изображений поверхности при температурах 700 °С и 900 °С приведены на вставках в рисунок 23. При температуре 700 °С интенсивность рефлексов реконструкции (8×8) выходит на полку, что связано с ограниченным количеством свободных адатомов, кремния присутствующих на поверхности при данной температуре и выступающих в роли строительного компонента для формирования упорядоченной структуры SiN [89]. По причине повышения концентрации свободных адатомов кремния на поверхности интенсивность рефлексов при высоких температурах нитридации (> 800 °С) выше, чем при низких температурах (<800 °С). Для температур выше 800

$^{\circ}\text{C}$ кинетические кривые процесса нитридации кремния имеют максимум, появление максимума связано с формированием на поверхности Si не только кристаллической фазы SiN, но и аморфной фазы SiN (СТМ изображение с островками аморфного SiN для участка кинетической кривой соответствующего гашению рефлексов (8×8) на дифракционной картине при температуре нитридации 900°C приведено на рисунке 23). Точками на рисунке отмечены используемые степени завершенности процесса нитридации, соответствующие выбранным условиям. Для температуры 900°C выбрана точка предшествующая перегибу кинетической кривой, с целью минимизировать количество образующихся в процессе нитридации островков аморфной фазы SiN на поверхности Si(111) при высокой температуре. Для температуры 700°C выбрана точка соответствующая полному выходу кинетической кривой на полку, с целью получения наибольшего покрытия поверхности кремния сверхструктурой (8×8).

Перед проведением процесса нитридации кремниевых подложек, производился их высокотемпературный отжиг до 1200°C , позволяющий при охлаждении получить на поверхности Si(111) реконструкцию (7×7). Влияние и важность процесса подготовки кремниевой подложки путём высокотемпературного отжига с целью получения реконструкции (7×7) подробно описана в работе [92]. После процесса нитридации на подложках Si выращивался зародышевый слой AlN толщиной 50 nm. Каждая из исследуемых серий состояла из трёх образцов с одинаковыми конструкциями буферных слоёв. Первая конструкция буферного слоя состояла из чередующихся слоёв GaN/AlN, толщиной 250 nm каждый (далее по тексту обозначена как «AlN-250»). Вторая конструкция представляла из себя сверхрешётку, включающую в себя 50 периодов GaN/AlN, суммарной толщиной 500 nm («CP»). Третья конструкция буферного слоя включала в себя слои AlN, $\text{Al}_{0,7}\text{GaN}$, $\text{Al}_{0,3}\text{GaN}$ толщиной 166 nm каждый (далее по тексту обозначена как «AlGaN»). Конструкции исследуемых гетероструктур представлены на рисунке 24. На рисунке 25 приведены данные СЭМ (для

ГЭС с буферными слоями «AlN-250» и «AlGaN») и ПЭМ (для ГЭС с буферным слоем «CP») подтверждающие конструкции и толщины исследуемых гетероструктур.

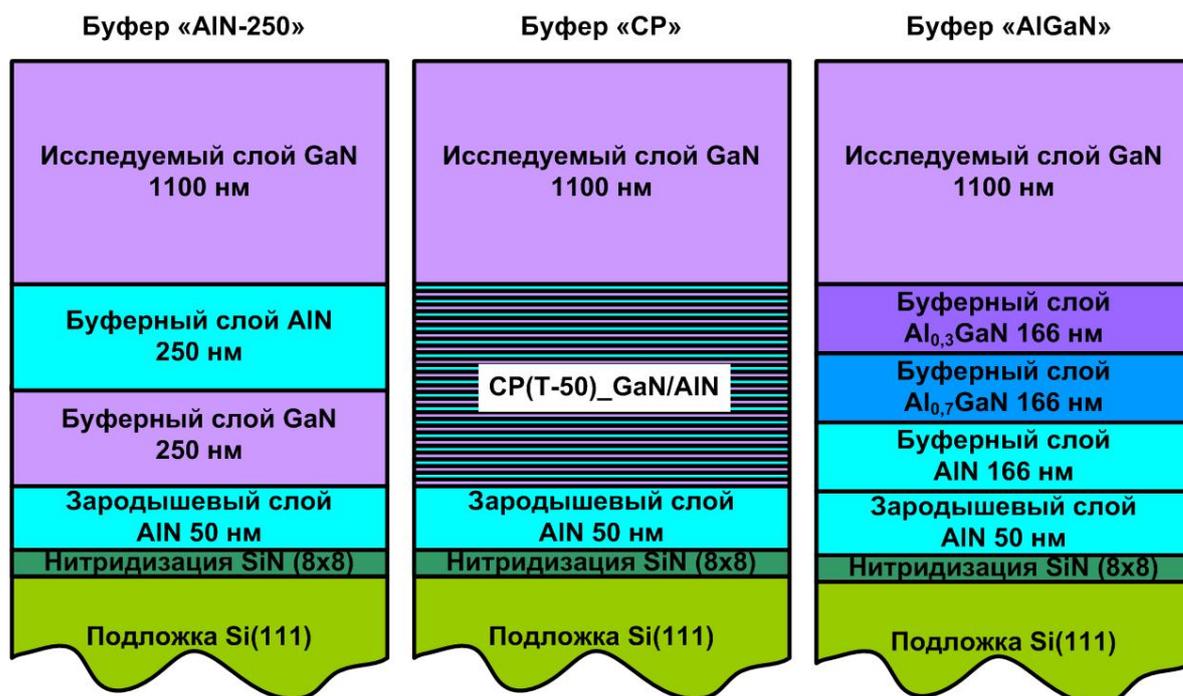


Рисунок 24 – Конструкции буферных слоёв исследуемых гетероструктур GaN-на-Si

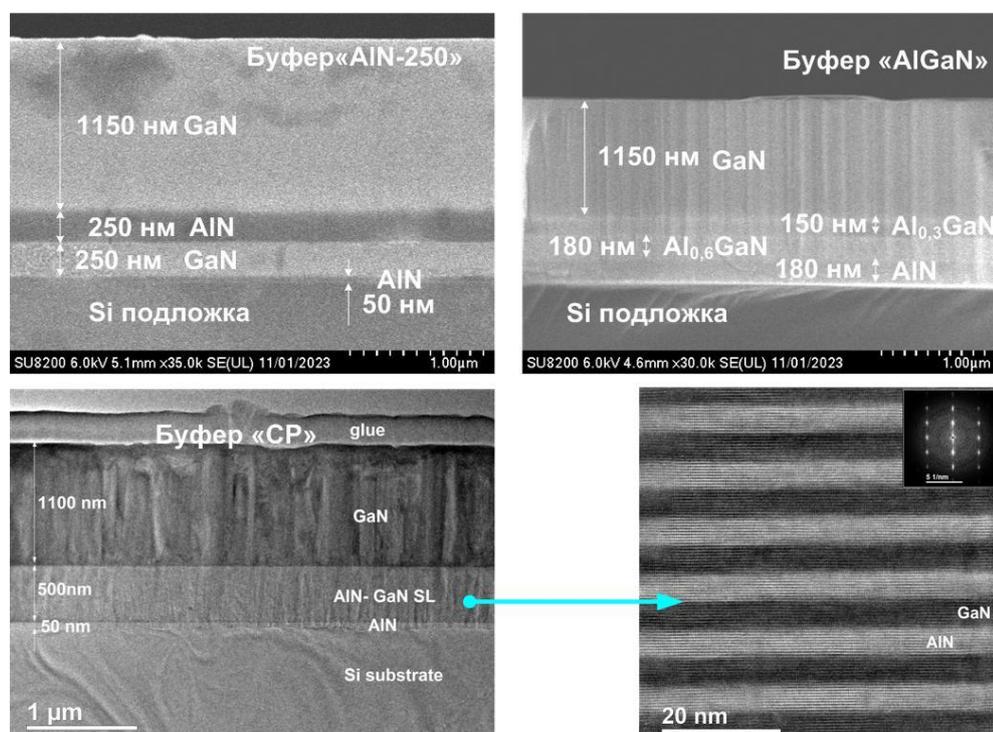


Рисунок 25 – Данные СЭМ и ПЭМ исследуемых гетероструктур GaN-на-Si с различными конструкциями буферных слоёв

Выращенные гетероструктуры исследовались с помощью оптической микроскопии с целью контроля трещин на поверхности. Для однозначной интерпретации видимых протяжённых дефектов на поверхности использовался тёмнопольный режим съёмки поверхности слоёв GaN, который наиболее чувствителен к трещинам на поверхности образцов. Изображения поверхности слоёв GaN-на-Si полученные с помощью оптического микроскопа Olympus BX53 приведены на рисунке 26. Из рисунка 26 видно, что при использовании температуры нитридации 900 °С в независимости от конструкции буферного слоя на поверхности слоёв GaN присутствуют трещины, однако следует отметить, что для буферов «AlN-250» и «AlGaN» плотность трещин значительно ниже, чем для буфера «CP». Первоначальная нитридизация Si при температуре 700 °С приводит к снижению плотности трещин на поверхности слоёв GaN для буфера «CP», а для буферов «AlN-250» и «AlGaN» позволяет получить свободные от трещин слои GaN.

Принимая во внимание данные работы [93], в которой Фабрис Семонд упоминает о процессе образования островков аморфной фазы SiN при проведении процесса нитридации при высоких температурах и учитывая замечания Никишина и др., о том, что образование аморфной фазы SiN способствует возникновению трещин в слоях GaN-на-Si [68], можно заключить следующее. Полученные в диссертационной работе результаты подтверждают предположения упомянутых авторов о том, что влияние нитридации Si на начальном этапе эпитаксиального роста и снижение плотности островков или исключение аморфной фазы SiN являются не менее важными условиями для подавления растрескивания образцов GaN-на-Si, чем выбор конструкции буферных слоёв. Помимо этого, из полученных данных становится очевидным тот факт, что конструкция буферного слоя, включающего AlN/GaN сверхрешётку не позволяет скомпенсировать растягивающие напряжения в гетероструктурах GaN-на-Si и подавить образование трещин.

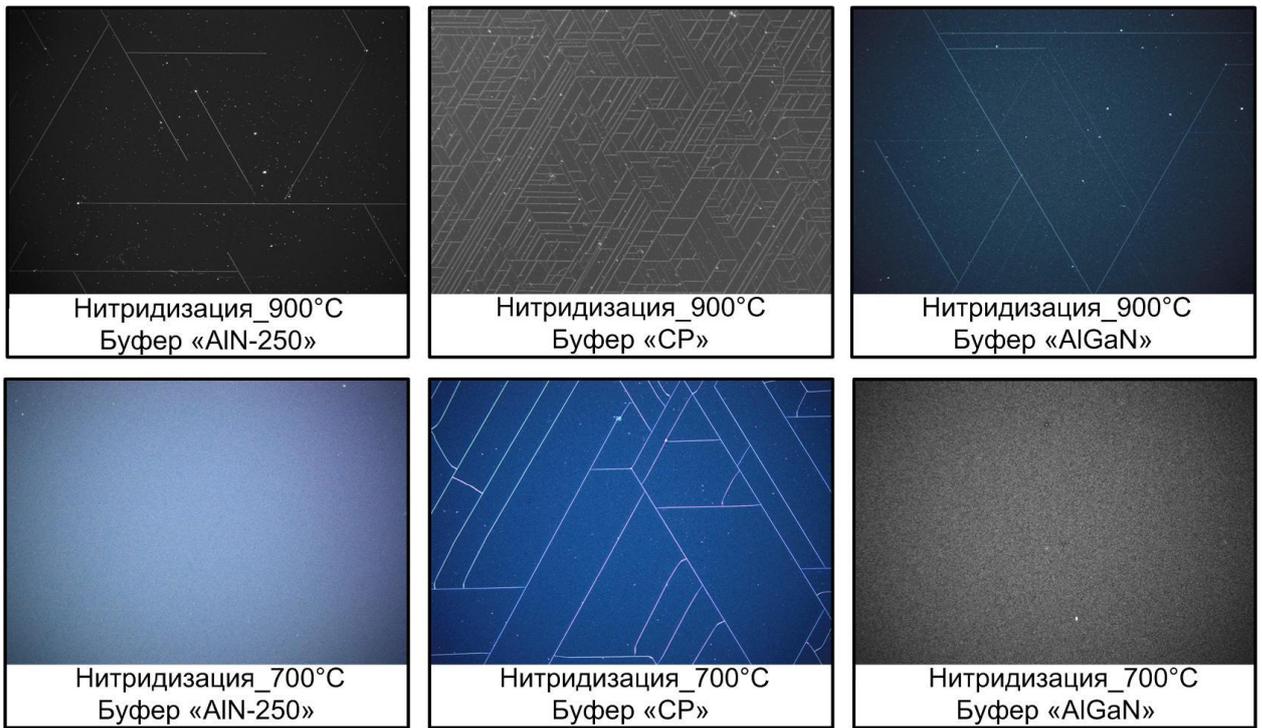


Рисунок 26 – Тёмнопольные изображения поверхности слоёв GaN-на-Si размером 3,5×2,5 мм выращенных при разных условиях нитридации и с использованием различных конструкций буфера

Поскольку трещины в плёнках GaN-на-Si представляют собой макродефекты, исследование растрескавшихся плёнок не представляет интереса. Свободные от трещин слои GaN-на-Si, выращенные с использованием низкотемпературной нитридации Si с применением конструкций буферных слоёв «AlN-250» и «AlGaN» исследовались методами АСМ, ДРЛ, ФЛ, КРС с целью определить наилучшую конструкцию буферного слоя с точки зрения морфологии поверхности, кристаллического совершенства и величины остаточных напряжений в слоях GaN-на-Si свободных от трещин.

Изображения морфологии поверхности слоёв GaN-на-Si выращенных с использованием низкотемпературной нитридации Si с применением конструкций буферных слоёв «AlN-250» и «AlGaN» приведены на рисунке 27. Приведённая морфология слоёв GaN не имеет существенных различий и указывает на тот факт, что морфология слоёв GaN определяется не конструкцией буфера, а условиями роста слоёв GaN (температура роста 800 °C при потоке аммиака 200 норм. см³/мин). На поверхности GaN

отчётливо различимы гексоганальные холмы диаметром в среднем около 700 нм и высотой около 5 нм ($R_{\text{rms}} < 5$ нм).

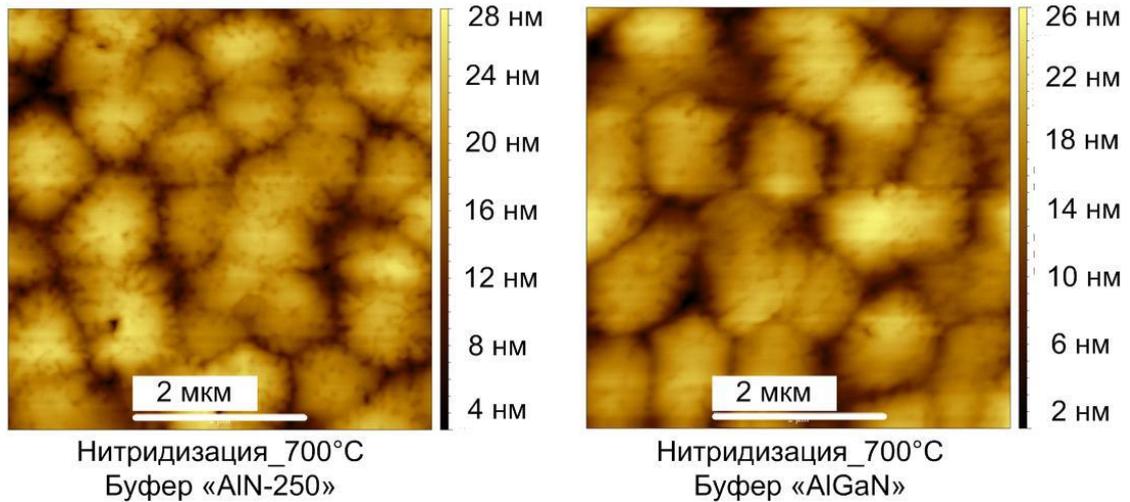


Рисунок 27 – АСМ изображения поверхности слоёв GaN-на-Si размером 5×5 мкм (Z -контраст = 25 нм)

Следует отметить, что подобная морфология поверхности слоёв GaN, выращенных методом NH_3 -МВЕ, используется при росте гетероструктур для GaN-HEMT исследователями из Materials Department University of California и CNRS-CRHEA, являющихся наиболее известными исследовательскими группами, развивающими технологию роста GaN методом NH_3 -МВЕ [94, 95, 96, 97].

Кристаллическое совершенство слоев GaN оценивалось методом ДРЛ из измерений полной ширины на половине высоты (ПШПВ) рентгеновских рефлексов. Исследования проводились методом трехосевой рентгеновской дифрактометрии с возможностью установить перед детектором щель апертурой 50 угл. с. Измерялись ПШПВ кривых качания симметричного рефлекса (0002), отражающего микро-разориентации плоскостей (0001) из-за дефектов, в основном, вертикальных винтовых дислокаций, и ПШПВ кривых качания кососимметричного рефлекса (10–15), которая чувствительна к смещениям, в частности, из-за наличия вертикальных краевых и смешанного типа дислокаций. Кривые качания, полученные при исследовании слоёв GaN-на-Si, выращенных с использованием низкотемпературной нитридации Si с

применением конструкций буферных слоёв «AlN-250» и «AlGaN» приведены на рисунке 28.

При сканировании с открытым детектором (без щели) в кривую дифракционного отражения вносят вклад ориентационные и дилатационные искажения пленки, как следствие для образца с буферным слоем «AlGaN» пики слоёв AlGaN перекрывают друг друга. Результатом сканирования с щелью перед детектором (красные кривые качания на рисунке 28) является кривая дифракционного отражения, пики на которой содержат вклад преимущественно дилатационных искажений пленки и не содержат вклад ориентационных искажений. Благодаря такому варианту сканирования удаётся разделить пики от слоёв AlGaN, входящих в буферный слой «AlGaN». Определённые из кривых качания значения ПШПВ GaN рефлексов (0002) и (10–15), выращенных гетероструктур GaN-на-Si указывают на преимущество буфера «AlGaN» над буфером «AlN-250» («AlGaN» 648(0002) и 551 (10–15) угл. с, «AlN-250» 758(0002) и 599(10–15) угл. с). Важно подчеркнуть, что более высокое кристаллическое совершенство слоёв GaN-на-Si с использованием буферных слоёв «AlGaN» следует связывать именно с конструкциями буферного слоя, поскольку условия нитридации и суммарная толщина выращенных плёнок одинаковы для обоих сравниваемых гетероструктур. Используя данные симметричных отражений (0002) из условия Брэгга-Вульфа, были рассчитаны межплоскостные расстояния (0001) (параметр решетки a_c) в направлении перпендикулярном поверхности. Для образца с конструкцией буферных слоёв «AlGaN» угол Брэгга составил $17,314^\circ$, что соответствует значению $a_c = 5,176 \text{ \AA}$, а для образца с конструкцией буферных слоёв «AlN-250» угол Брэгга составил $17,340^\circ$, что соответствует значению $a_c = 5,169 \text{ \AA}$. Из сравнения полученных значений с параметром пленки GaN в свободном состоянии ($a_c = 5,178 \text{ \AA}$), можно определить характер напряжений в плёнках GaN. Кристаллические решетки пленок GaN-на-Si сжаты в направлении перпендикулярном поверхности и соответственно растянуты в латеральном направлении. При этом напряжения

растяжения в латеральном направлении для образца с буфером «AlGaN» меньше, чем у образца с буфером «AlN-250».

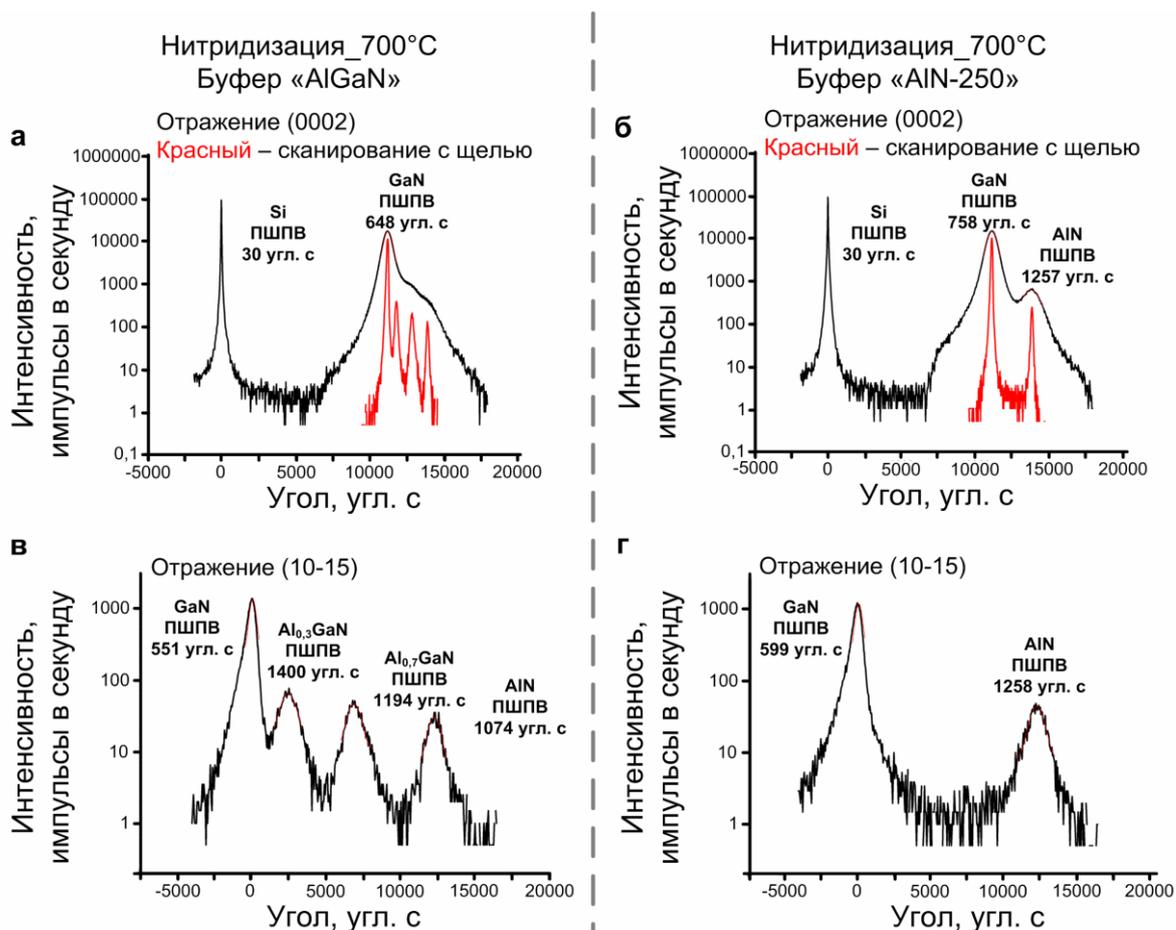


Рисунок 28 – Кривые качания слоёв GaN-на-Si: *а, б* – для отражений (0002), *в, г* – для отражений (10–15), для конструкции буферных слоёв «AlGaN», слева и конструкции буферных слоёв «AlN-250», приведённые на рисунке красные кривые качания симметричного рефлекса (0002) получены в результате сканирования с щелью перед детектором апертурой 50 угл. с.

Для определения величины остаточных упругих напряжений в эпитаксиальных слоях GaN-на-Si, выращенных с использованием конструкций буферных слоёв «AlGaN» и «AlN-250», ГЭС были исследованы методом КРС. Спектры комбинационного рассеяния света регистрировались при комнатной температуре в геометрии обратного рассеяния. Напряжения в плоскости слоев GaN-на-Si определялись по формуле $\sigma_a = \Delta\omega/K$, где $\Delta\omega$ – разность между измеренной частотой колебаний фононов симметрии E_2 (high) и значением $567,8 \text{ см}^{-1}$ для недеформированного нитрида галлия и

$K = -2,7 \text{ см}^{-1} \times \text{ГПа}^{-1}$ [98]. Спектры КРС исследуемых образцов, приведены на рисунке 29 и в таблице 1. Отрицательная разность частот означает $\Delta\omega$, что исследуемые пленки GaN-на-Si растянуты, при этом остаточные напряжения растяжения в слоях GaN-on-Si выращенных на буферном слое «AlGaN» меньше чем на буферном слое «AlN-250» (+0.63 и +0.81 GPa соответственно). Отрицательная разность частот означает $\Delta\omega$, что исследуемые пленки GaN-на-Si растянуты, при этом остаточные напряжения растяжения в слоях GaN-on-Si выращенных на буферном слое «AlGaN» меньше, чем на буферном слое «AlN-250» (+0.63 и +0.81 GPa соответственно). ПШПВ пиков $E_2(\text{high})$ указывают на более высокое структурное совершенство слоёв GaN-on-Si, выращенных на буферном слое «AlGaN» (6.0 и 5.8 см^{-1} соответственно).

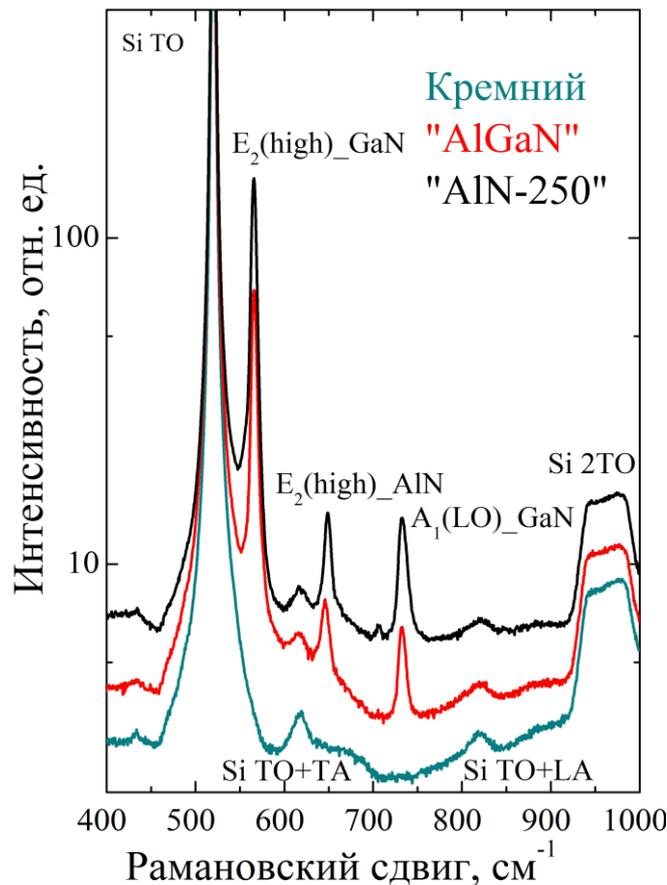


Рисунок 29 – Поляризованные спектры КРС исследуемых слоев GaN-на-Si и Si-подложки. $T = 300\text{K}$, геометрия рассеяния $z(x\bar{x})z$ (ось z совпадает с направлением роста)

Таблица 1 – Результаты исследования плёнок GaN-on-Si методом КРС

Тип конструкции буферных слоёв	Параметр	Величина
«AlN-250»	$\Delta\omega$, см^{-1}	-2.2
	σ_a , ГПа	+0.81
	ПШПВ, E2(high), см^{-1}	6.0
«AlGaN»	$\Delta\omega$, см^{-1}	-1.7
	σ_a , ГПа	+0.63
	FWHM, E2(high), см^{-1}	5.8

Согласно данным, полученным из спектров КРС, можно заключить, что слои GaN-на-Si выращенные с использованием конструкции буферных слоёв «AlGaN» имеют меньшие остаточные напряжения растяжения и более высокое кристаллическое совершенство, по сравнению со слоями GaN-on-Si выращенных с использованием конструкции буферных слоёв «AlN-250». Данный результат указывает на преимущество буфера «AlGaN» над буфером «AlN-250» и согласуется с данными ДРЛ для данных гетероструктур.

Проведённые исследования подтверждают влияние условий процесса нитридации на процесс образования трещин в слоях GaN-на-Si. Экспериментально установлено, что высокая температура нитридации, не позволяет выращивать свободные от трещин слои GaN-на-Si методом NH_3 -МВЕ. Использование низкотемпературной нитридации кремния в комплексе с применением конструкций буферных слоёв с интеркалированным слоем AlN или с переходными слоями AlGaN со ступенчатым снижением состава по Al, позволяет выращивать свободные от трещин слои GaN-на-Si. Морфология слоёв GaN-на-Si не зависит от конструкции буферного слоя, а определяется ростовыми условиями GaN. Слои GaN-на-Si, выращенные с использованием конструкции буферного слоя с переходными слоями AlGaN со ступенчатым снижением состава по Al,

обладают более высоким кристаллическим совершенством и меньшими остаточными растягивающими напряжениями [А4].

3.3 Влияние нитридации кремниевой подложки на остаточные напряжения в зародышевых слоях AlN-на-Si

Для объяснения, установленного в диссертационной работе, эффекта влияния условий нитридации кремниевой подложки на образование трещин в слоях GaN-на-Si дальнейшие исследования были направлены на изучение влияния условий нитридации Si на механические напряжения в зародышевых слоях AlN-на-Si. Для этого на первом этапе была проведена серия экспериментов по экспонированию поверхности кремния при разных дозах аммиака (от 0,3 до 50 Лэнгмюр) в отдельной установке Riber, совмещенной с СТМ микроскопом и оборудованием для регистрации ДК методом ДБЭО. В результате экспериментов были получены СТМ изображения морфологии нитридированной поверхности кремния. Благодаря тому, что СТМ микроскоп был совмещен вакуумной камерой оборудованной ДБЭО, стало возможным сопоставление результатов исследований морфологии нитридированной поверхности кремния методом СТМ с ДК, полученными в аналогичных условиях методом ДБЭО в установке NH₃-МВЕ, с последующей проекцией полученных данных на кинетическую кривую нитридации (см. рисунок 30).

Приведённые на рисунке 30 эволюции СТМ изображений и дифракционных картин в процессе нитридации, начиная с чистой поверхности кремния до подачи аммиака в ростовую камеру (точка 1). Использование малых доз аммиака (до 5 Лэнгмюр) позволило наглядно продемонстрировать на СТМ изображениях самые начальные стадии нитридации кремния до формирования упорядоченной кристаллической структуры SiN (8×8) и аморфной фазы Si₃N₄. Важно обратить внимание, что кинетическая кривая была получена из анализа эволюции ДК, полученной *in situ* методом ДБЭО в установке МВЕ, при нитридации поверхности

кремния в потоке аммиака 1 норм. см³/мин при температуре 850 °С. В свою очередь, СТМ изображения были получены после экспонирования поверхности образца при разных дозах аммиака при температуре 850 °С с последующим охлаждением до комнатной температуры. Стоит подчеркнуть, что при температуре 850 °С реконструкция (7×7) на исходной поверхности (до нитридации) уже не наблюдается, поскольку температура выше температуры реконструкционного перехода (7×7) в (1×1), в отличие от СТМ изображений, полученных при комнатной температуре. При подаче малых доз аммиака (0,3 Лэнгмюра), поверхность кремния преобразуется в модифицированную структуру (7×7)_N с адсорбированными на нее радикалами аммиака, атомами азота и появившимися химическими связями Si-N (точка 2 на кинетической кривой рисунка 30).

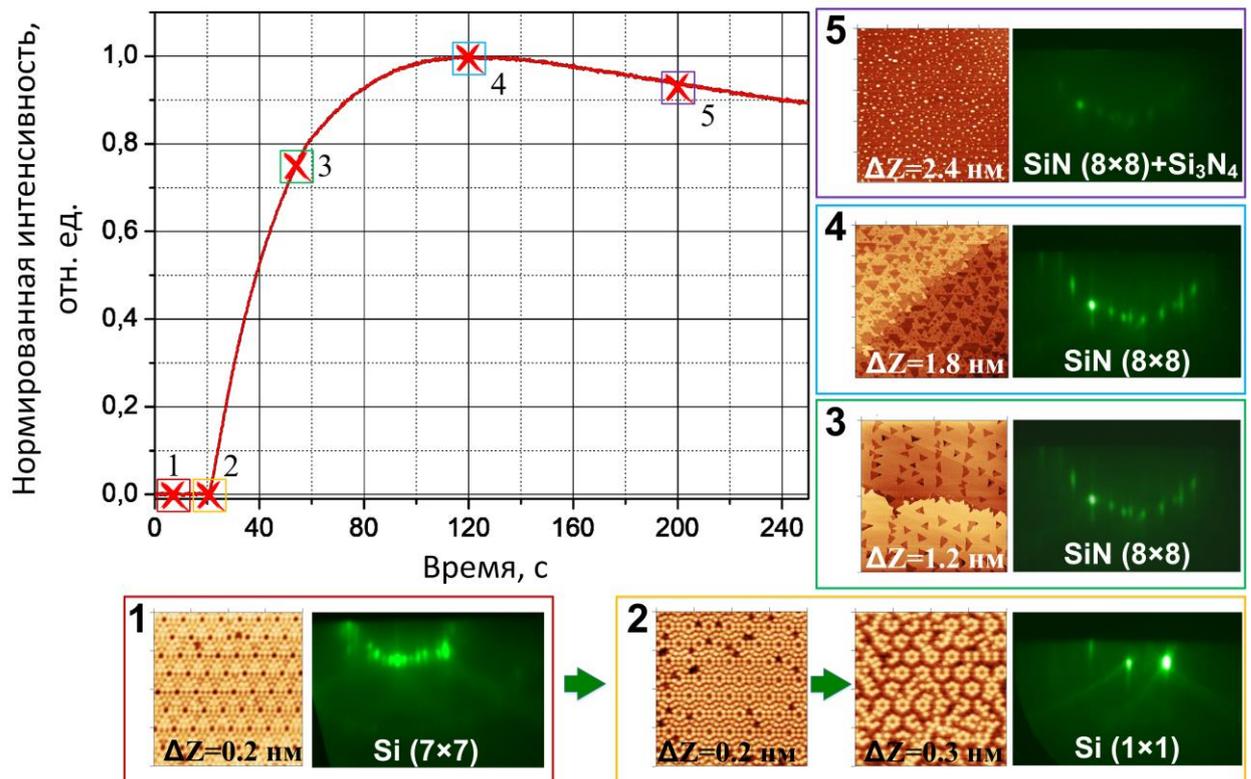


Рисунок 30 – Качественное сравнение СТМ изображений морфологии поверхности кремния с ДК в процессе эволюции сформированной сверхструктуры (8×8) на кинетической кривой, полученной методом ДБЭО в процессе нитридации в потоке аммиака 1 норм. см³/мин при 850 °С

Данная структура предшествует образованию на поверхности кремния (7×7) кристаллического слоя нитрида кремния (подробнее процесс формирования модифицированной структуры $(7\times 7)_N$ описан в работе [90]). От точки 2, отмеченной на кинетической кривой нитридации, начинается зарождение двумерной кристаллической фазы нитрида кремния, зародыши в СТМ проявляются в виде темных островков треугольной формы, при этом на дифракционных картинах наблюдается появление сверхструктуры (8×8) с постепенным увеличением интенсивности рефлексов. С продолжением нитридации, размеры и плотность треугольных островков увеличиваются (точки 3 и 4 на кинетической кривой, приведённой на рисунке 30), пока не достигается максимально возможное покрытие поверхности кристаллической фазой SiN. Длительное экспонирование поверхности в аммиаке приводит к формированию аморфных кластеров Si_3N_4 (точка 5 на кинетической кривой рисунок 30), при этом интенсивность дифракционных рефлексов снижается. Образование кластеров аморфного нитрида кремния Si_3N_4 , наблюдаемых на СТМ изображении при длительной нитридации, согласуется с наблюдаемым снижением интенсивности дифракционных рефлексов, регистрируемых методом ДБЭО.

Действительно, атомное строение самих аморфных кластеров (островков) не имеет периодической структуры и поэтому они, покрывая некоторую долю поверхности, не формируют собственных дифракционных рефлексов, хотя участвуют в рассеянии части первичных и дифрагированных электронов. Кроме того, из-за малых скользящих углов падения электронного пучка в методе ДБЭО $\sim (1-3)^\circ$ такие 3D неупорядоченные островки из-за случайного (в том числе и неупругого) рассеяния электронов первичного и дифракционных пучков создают «затененные» области на упорядоченных участках поверхности кремния со структурой (8×8) , от которых вклад в дифракционную картину уменьшается (по площади «затененные» области оказываются заметно больше, чем площадь поверхности, занимаемая

аморфными кластерами Si_3N_4), что тоже проявляется в наблюдаемом снижении интенсивности рефлексов на ДК.

На втором этапе были проведены исследования влияния температуры нитридации кремниевой подложки при оптимальных стадиях завершённости процесса нитридации (максимального покрытия поверхности кремния кристаллической фазой нитрида кремния) на морфологию поверхности и структурное качество зародышевых слоев AlN-на-Si. Для этого образцы AlN-на-Si выращивались на нитридованных кремниевых подложках при температурах нитридации 700 и 800 900 °С. Учитывая результаты сопоставления ДК и данных СТМ, были выбраны точки 1 и 2 3, соответствующие оптимальной нитридации с максимальным покрытием поверхности кремния кристаллической фазой нитрида кремния (рисунок 31). Кинетические кривые на рисунке 31 намеренно не нормированы на максимумы интенсивности соответствующих дифракционных (11/8) рефлексов, чтобы наглядно показать различные значения интенсивностей при разных температурах. Предполагается, что этот эффект обусловлен различной плотностью покрытия поверхности кремния кристаллической фазой нитрида кремния.

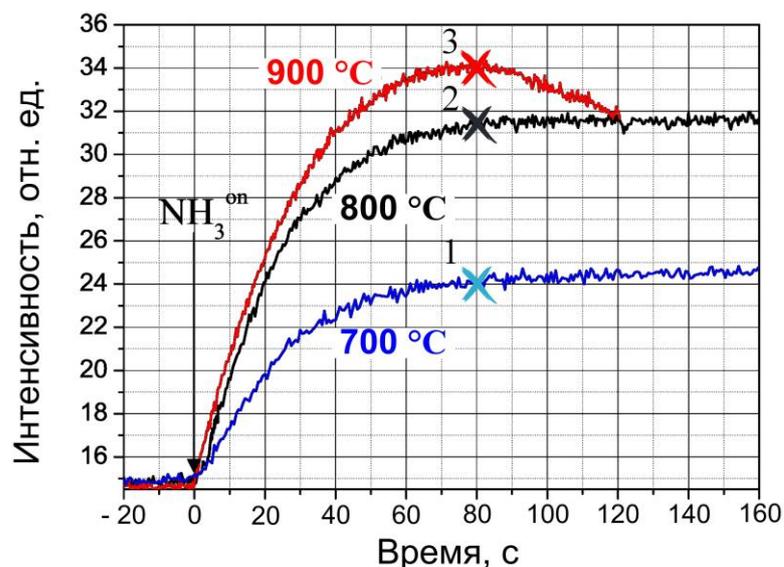


Рисунок 31 – Кинетические кривые процесса нитридации, полученные при различных температурах подложки в потоке аммиака 1 норм. см³/мин

Следует отметить, что, согласно данным ДБЭО, рост зародышевого слоя AlN на чистой (не нитридизованной) или слабонитридизованной (т.е. первые 20 с после введения аммиака в ростовую камеру) поверхности кремния приводит к образованию поликристаллической фазы AlN (рисунок 32а). На рисунке 31б представлена дифракционная картина двумерного кристаллического зародышевого слоя AlN, которая соответствует отмеченным на рисунке 31 оптимальным стадиям завершённости процесса нитридации. Согласно данным ДБЭО и СТМ, образование большого количества аморфных островков SiN связано с длительной нитридизацией поверхности кремния при высоких температурах. Это приводит к образованию разориентированных доменов AlN в процессе роста зародышевого слоя AlN (см. рисунок 32в).

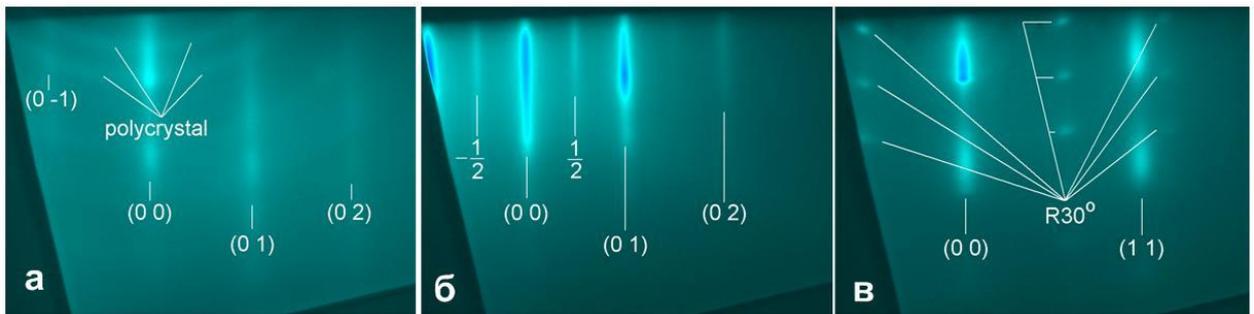


Рисунок 32 – Дифракционные картины поверхностей зародышевого слоя AlN, зарегистрированные после охлаждения до температуры 500 °С в потоке аммиака 20 норм. см³/мин, полученные при различных стадиях завершённости процесса нитридации кремния

На рисунке 33 представлены АСМ-изображения размером 5×5 мкм² поверхности зародышевых слоев нитрида алюминия, выращенных при температурах 700, 800 и 900 °С. Примечательно, что по данным АСМ-изображений при температуре нитридации 900 °С на поверхности зародышевого слоя AlN-на-Si наблюдаются дефекты высокой плотности (рисунок 33с), тогда как на поверхности зародышевого слоя AlN-на-Si, выращенного при температуре нитридации 700 °С (рисунок 33а), плотность таких дефектов существенно ниже. Подобного рода дефекты

поверхности слоёв AlN-на-Si исследовались в работе И.А. Милёхина с коллегами [99]. Данные объекты являются инверсионными доменами (ID), которые представляют собой AlN азотной полярности. Среднеквадратичная шероховатость поверхности зародышевого слоя AlN в точке 1 при $T = 700\text{ }^{\circ}\text{C}$ составила 1,28 нм, а в точке 2 при $T = 800\text{ }^{\circ}\text{C}$ – 0,74 нм. Наименьшая среднеквадратичная шероховатость зародышевого слоя AlN при температуре азотирования $900\text{ }^{\circ}\text{C}$ составила 0,5 нм для точки 3, отмеченной на кинетической кривой нитридации на рисунке 31.

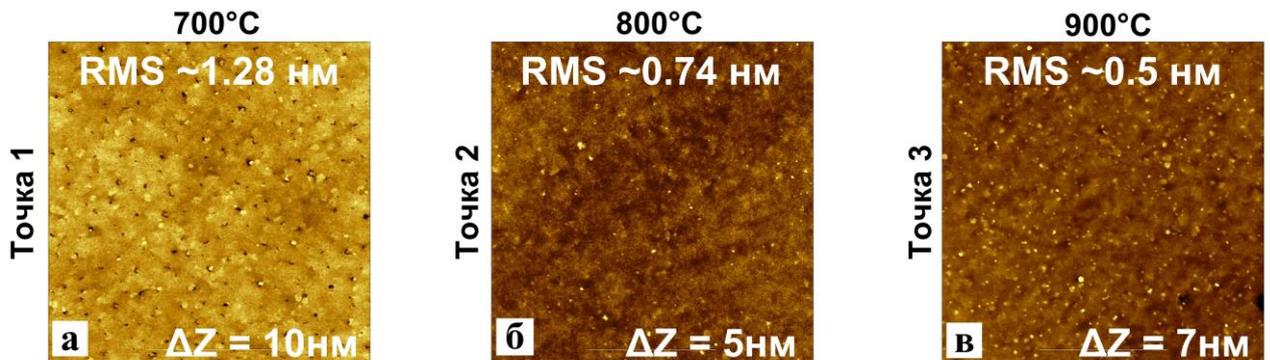


Рисунок 33 – АСМ-изображения $5 \times 5\text{ мкм}^2$ поверхности зародышевых слоев AlN, выращенных в отмеченных на рисунке 30 точках кинетических кривых процесса нитридации: *а* – при $T = 700\text{ }^{\circ}\text{C}$ в точке 1, *б* – при $T = 800\text{ }^{\circ}\text{C}$ в точке 2, *в* – при $T = 900\text{ }^{\circ}\text{C}$ в точке 3

Остаточные механические напряжения в зародышевых слоях AlN-on-Si и их структурное совершенство, были исследованы методом КРС. Как видно из рисунка 34*а*, КРС спектры, демонстрируют пики фононной моды $E_2(\text{high})$, характерной для AlN. Измерения ПШПВ пика $E_2(\text{high})$ в спектрах КРС использовались для оценки кристаллического качества зародышевых слоев. Наиболее структурно совершенным является образец, выращенный при температуре нитридации $900\text{ }^{\circ}\text{C}$ в точке 3, для которого значение ПШПВ пика $E_2(\text{high})$ составило $10,47\text{ см}^{-1}$. Результаты оценки кристаллического качества зародышевых слоев AlN-on-Si по данным рамановского рассеяния суммированы в Таблице 2. Такой эффект может быть связан с более высоким кристаллическим качеством слоя нитрида кремния, сформированного при более высоких температурах, или с более плотным покрытием поверхности

слоем кристаллического нитрида кремния, о чем свидетельствуют данные ДБЭО, приведенные в [87], демонстрирующие более высокий уровень интенсивности рефлексов реконструкции (8×8).

Увеличенные масштабы рамановских сдвигов фононной моды $E_2(\text{high})$ AlN показаны на рисунке 34б. Следует отметить, что для калибровки КРС спектров был получен спектр исходной кремниевой подложки Si(111), для анализа положения пиков $E_2(\text{high})$ исследуемых образцов AlN-на-Si

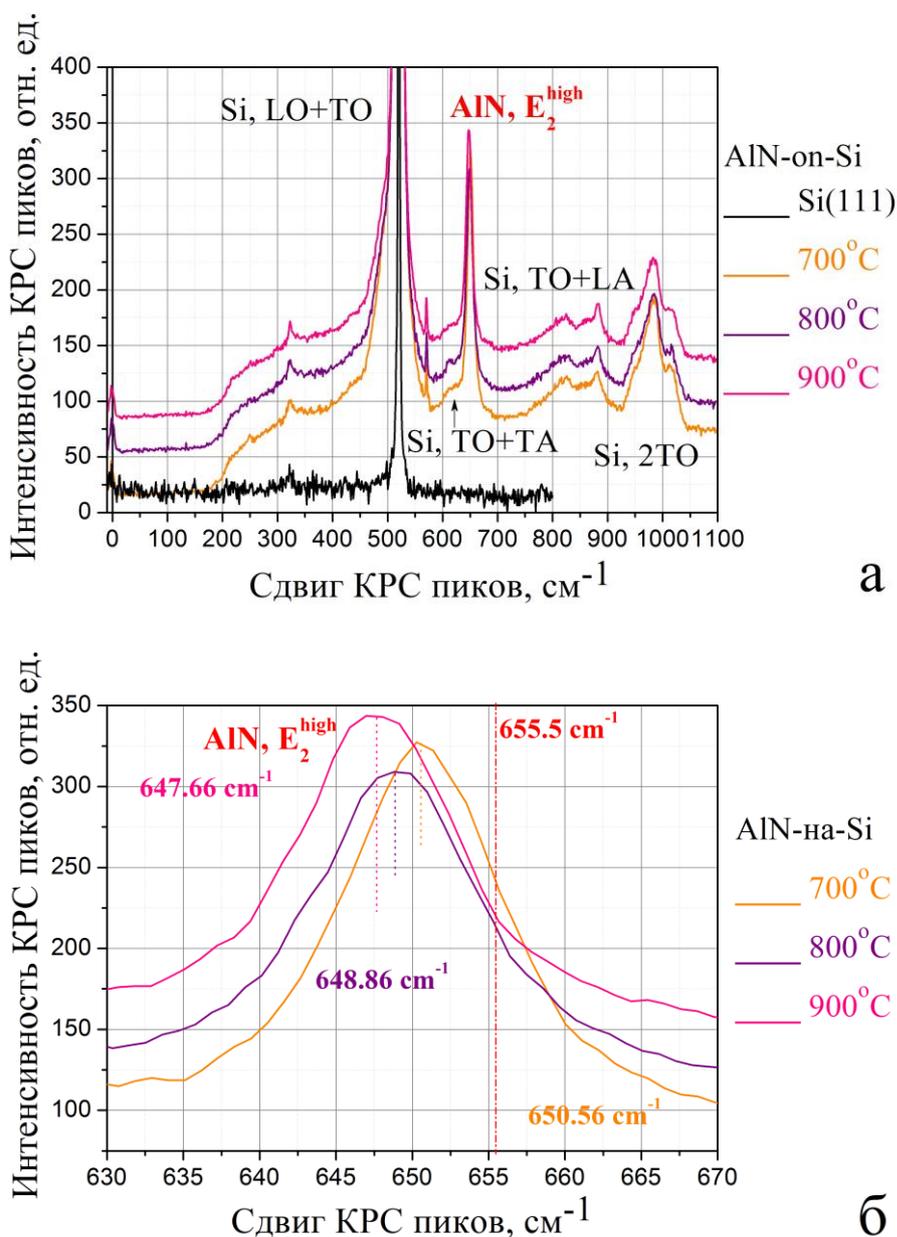


Рисунок 34 – КРС спектры исследуемых зародышевых слоев AlN:
 а – весь диапазон от -10 до 1100 cm^{-1} , б – диапазон частот вблизи полосы $E_2(\text{high})$

Фактически, сдвиг $E_2(\text{high})$ AlN чувствителен к двуслойной деформации вдоль c -плоскости AlN, которая часто используется для оценки напряжений в пленках AlN [68]. Очевидно, что все пики $E_2(\text{high})$ AlN смещены в область низких частот по сравнению с объемным значением $655,5 \text{ см}^{-1}$ [100, 101], что указывает на остаточное растягивающее напряжение во всех зародышевых слоях AlN. Таким образом, остаточные двуслойные напряжения в зародышевых слоях можно оценить, используя данные положения пиков $E_2(\text{high})$ приведённые на рисунке 34б. Результаты оценки остаточных двуслойных напряжений в зародышевых слоях AlN-на-Si по спектрам КРС приведены в таблице 2.

Таблица 2 – Результаты исследования зародышевых слоев AlN методом комбинационного рассеяния света

Температура	Характеристики	Величины
900 °С	$\Delta\omega, \text{ см}^{-1}$	7.84
	$\sigma, \text{ ГПа}$	2.31
	ПШПВ $E_2(\text{high}), \text{ см}^{-1}$	10.47
800 °С	$\Delta\omega, \text{ см}^{-1}$	6.64
	$\sigma, \text{ ГПа}$	1.96
	ПШПВ $E_2(\text{high}), \text{ см}^{-1}$	10.90
700 °С	$\Delta\omega, \text{ см}^{-1}$	4.94
	$\sigma, \text{ ГПа}$	1.46
	ПШПВ $E_2(\text{high}), \text{ см}^{-1}$	11.43

Образцы AlN-on-Si, выращенные с использованием температур нитридации 800 и 900 °С, характеризуются большими остаточными растягивающими напряжениями в зародышевых слоях AlN по сравнению с образцом, использованном при низкотемпературной нитридации (700 °С). Предполагается, что в областях, свободных от кристаллической фазы SiN на поверхности Si, при повышенных температурах могут образовываться

зародыши аморфной фазы нитрида кремния. Последующий эпитаксиальный рост зародышевых слоев AlN на таких аморфных кластерах приводит к образованию разориентированных островков AlN, что в свою очередь приводит к появлению дополнительных растягивающих напряжений.

Для того, чтобы установить влияние условий нитридации на гетерограницу интерфейса AlN/Si зародышевые слои AlN-на-Si, выращенные на нитрированной поверхности кремния при температурах нитридации 700 °C и 900 °C (в точках 1 и 3 отмеченных на рисунке 31) исследовались методом ПЭМ высокого разрешения с использованием анализа изображений с помощью быстрого преобразования Фурье (FFT). Данные условия нитридации были выбраны из-за максимальной разницы в температуре нитридации с целью выявления ее влияния на свойства границы интерфейса AlN/Si. Плоскость наблюдения ПЭМ изображений FFT соответствует набору плоскостей {101} подложки Si и {-1100} AlN в реальном пространстве. Определение рефлексов, связанных с ПЭМ изображениями, выполнялось путем формального геометрического построения обратных решеток 2D для различных плоскостей слоя AlN и подложки Si, при этом кристаллическая решетка подложки Si рассматривалась как эталонная. Изображения ПЭМ зародышевых слоев AlN, сформированных на поверхности кремния, нитрированной при 700 °C и 900 °C, выявили области с различными интерфейсами AlN/Si(111): 1) AlN/аморф-Si₃N₄/Si, 2) AlN/SiN(8×8)/Si и 3) AlN/Si с резкой границей интерфейса. Важно отметить, что эти три типа интерфейсов наблюдались на образцах, выращенных с использованием высокотемпературной и низкотемпературной нитридаций, но в разных соотношениях. Для нитридации при 700 °C преимущественно наблюдались второй и третий типы интерфейсов. При 900 °C намного чаще наблюдалась картина, соответствующая первому типу интерфейса.

На рисунке 35а показан зародышевый слой AlN, расположенный непосредственно поверх аморфного слоя Si₃N₄ толщиной около 2 нм,

который сформирован в виде сплошной пленки на границе раздела AlN/Si и имеет высокий контраст относительно подложки Si, как можно видеть на увеличенном изображении выделенной области на рисунке 35а.

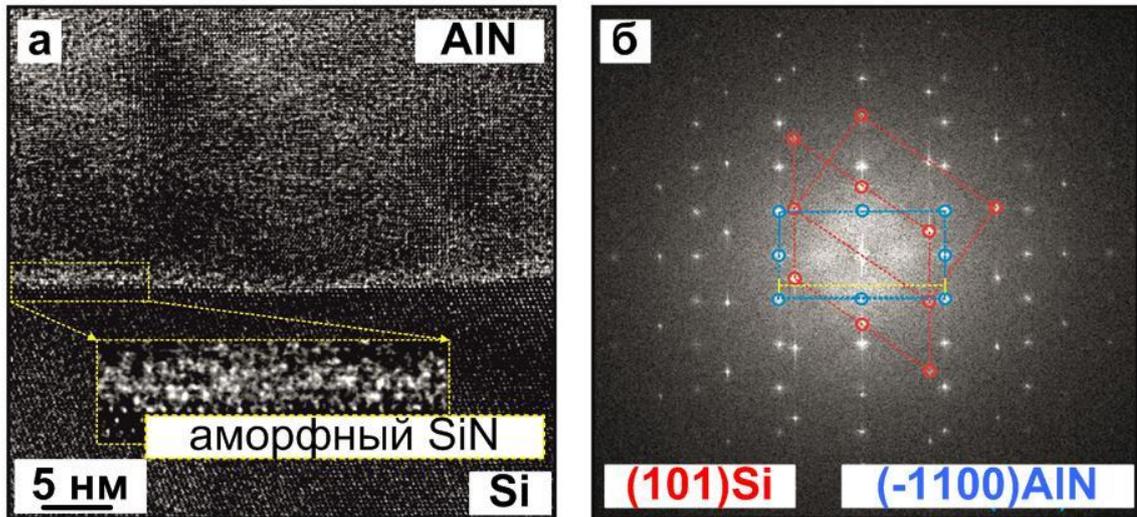


Рисунок 35 – ПЭМ изображение высокого разрешения: *а* – интерфейс AlN/аморф-Si₃N₄/Si, *б* – изображение FFT зародышевого слоя AlN-на-Si (рефлексы, выделенные синими кругами) и подложки Si (рефлексы, выделенные красными кругами)

Отсутствие дальнего порядка в аморфном слое Si₃N₄ приводит к нарушению самого условия эпитаксии (т.е. ориентированного роста кристаллов на атомно-упорядоченной поверхности кристаллической подложки) и, как следствие, к зарождению фаз AlN с различной ориентацией и снижению кристаллического качества слоя AlN. На изображении FFT (см. рисунок 35б) отчетливо различимы два набора рефлексов, один из которых соответствует подложке Si (выделено красными кружками), а другой — слою AlN (выделено синими кружками). Было обнаружено, что аморфный слой Si₃N₄ приводит к упругим напряжениям в слое AlN, поскольку измеренное значение латеральной постоянной решетки зародышевого слоя AlN по расстоянию между пятнами вдоль желтой линии, показанной на ПЭМ изображении рисунок 35б, составило $3,15 \pm 0,01 \text{ \AA}$, что больше значения $3,12 \text{ \AA}$ для недеформированного AlN и означает, что слой AlN находится под растягивающими напряжениями.

На оптимальной стадии завершения процесса нитридации поверхности Si при температуре 700 °C достигается максимальное покрытие поверхности кристаллической фазой SiN с минимальным содержанием аморфной фазы Si₃N₄. Как показано в [88,90], в условиях контролируемой нитридации поверхности Si, SiN появляется в виде кристаллических островков толщиной 1–2 монослоя. При последующем осаждении Al без потока аммиака химически активные атомы металла взаимодействуют с остаточным азотом, адсорбированным на поверхности, а также способны «отнимать» азот у кремния, в результате чего кристаллические островки SiN частично трансформируются в эпитаксиальные островки AlN.

В случае осаждения алюминия на кристаллические островки SiN толщиной 2 монослоя верхний слой SiN трансформируется в AlN, который находится непосредственно поверх монослоя SiN, как показано на ПЭМ изображении, приведённом на рисунке 36а. Увеличенное изображение интерфейса AlN/SiN(8×8)/Si на рисунке 36а явно демонстрирует, что верхний монослой подложки Si имеет увеличенное межплоскостное расстояние 3,3 Å и, следовательно, может быть отнесен к кристаллическому графеноподобному SiN с ван-дер-ваальсовой природой связей [88]. Слой SiN, который слабо связан с поверхностью кремния из-за наличия π-связей между соседними атомами, позволяет сформировать ненапряженный слой AlN. Измеренное значение латеральной постоянной решетки зародышевого слоя AlN из расстояния между пятнами вдоль желтой линии FFT изображения, приведённого на рисунке 36б составило 3,12±0,01 Å, что коррелирует со значением 3,12 Å для ненапряженного слоя AlN.

При осаждении Al на нитридованную поверхность Si с кристаллическими островками SiN толщиной в 1 монослой SiN с высокоупорядоченной структурой (8×8) преобразуется в AlN со структурой (4×4) непосредственно на поверхности Si без промежуточного слоя SiN, как показано на ПЭМ изображении, приведённом на рисунке 37а.

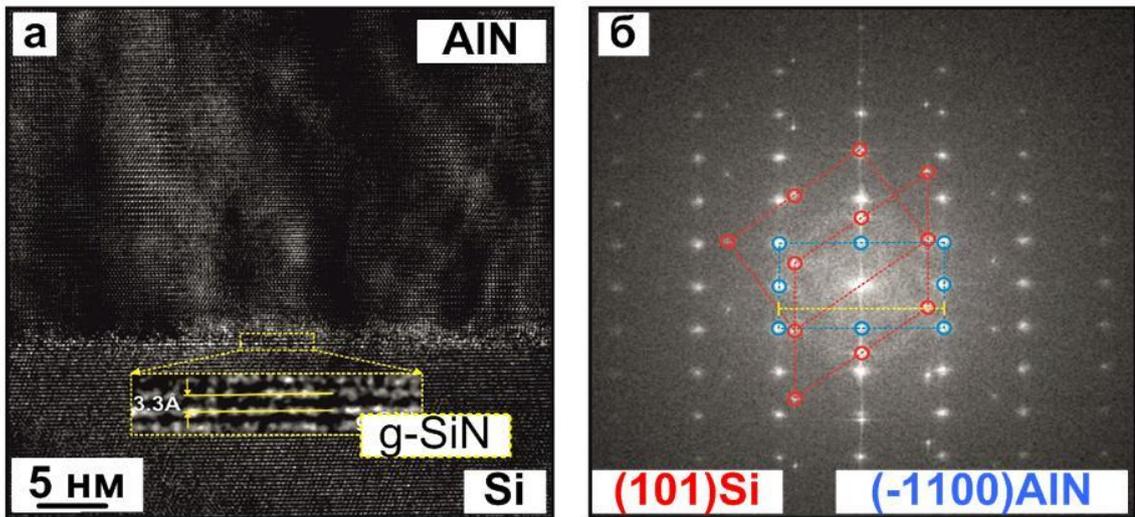


Рисунок 36 – ПЭМ изображение высокого разрешения: *a* – интерфейс AlN/SiN(8×8)/Si, *б* – FFT ПЭМ изображения зародышевого слоя AlN (рефлексы, выделенные синими кругами) и подложки Si (рефлексы, выделенные красными кругами)

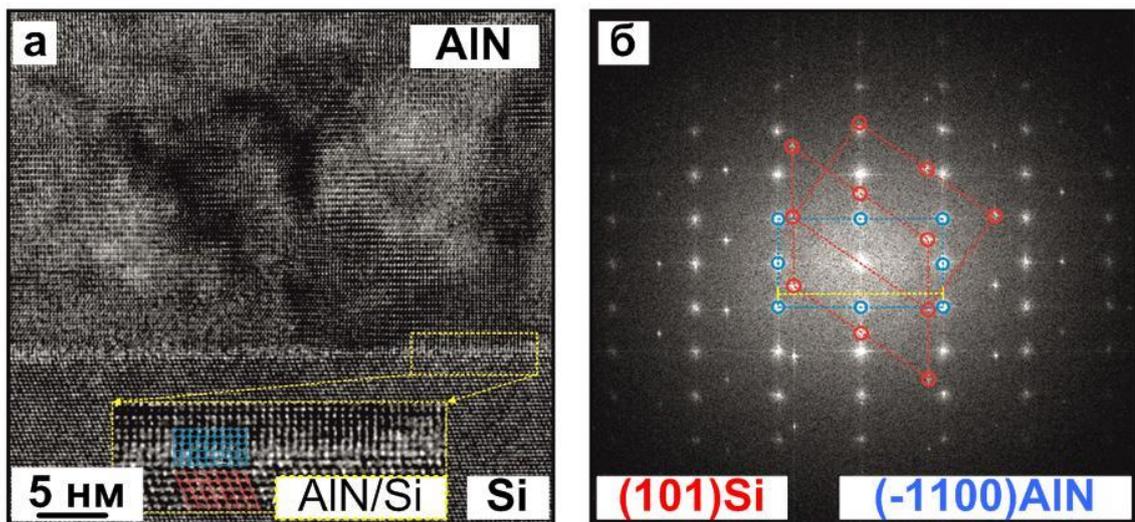


Рисунок 37 – ПЭМ изображение высокого разрешения: *a* – интерфейс AlN/Si, *б* – FFT ПЭМ изображения зародышевого слоя AlN (рефлексы, выделенные синими кругами) и подложки Si (рефлексы, выделенные красными кругами)

Как видно из увеличенного изображения интерфейса AlN/Si, между слоем AlN и подложкой отсутствует кристаллическая фаза SiN или аморфная фаза Si_3N_4 , что указывает на то, что AlN в этом случае напрямую контактирует с подложкой Si. Важно подчеркнуть, что прямое расположение зародышевого слоя AlN на Si, полученное путем преобразования 1 монослоя

SiN в AlN, не эквивалентно эпитаксиальному росту зародышевого слоя AlN на чистой поверхности кремния без нитридации, поскольку в последнем случае рост приводит к разной ориентации зародышей AlN и (см. рисунок 32). Несмотря на существенное различие значений латеральных постоянных решетки AlN и Si (около 19 %), после преобразования 1 монослоя SiN в фазу AlN становится возможным непосредственное расположение зародышевого слоя AlN на Si за счет упорядоченного расположения каждых 5 периодов алюминия на 4 периодах кремния. Это подтверждается соотношением $4 \times a_{\text{Si}(111)} = 5 \times a_{\text{AlN}}$, где $a_{\text{Si}(111)} = 3,85 \text{ \AA}$ и $a_{\text{AlN}} = 3,08 \text{ \AA}$ [102], что существенно меньше значения латеральной постоянной решетки $3,12 \text{ \AA}$ для объемного вюрцитного кристалла AlN. При одновременной подаче двух компонентов (Al и NH₃) на поверхность с такими двумерными зародышами AlN происходит эпитаксиальный рост слоя AlN с резким изменением постоянной решетки от $3,08 \text{ \AA}$ до $3,125 \text{ \AA}$. Критическая толщина смены постоянной решетки AlN согласно экспериментальным данным составляет ~5–6 монослоев с переходом от графитоподобной (гибридизация sp^2) к вюрцитной структуре AlN (гибридизация sp^3) в результате релаксации напряжений из-за введения дислокаций несоответствия [103]. На увеличенном изображении интерфейса (см. рисунок 37а) сетка выделяет области пространственной решетки AlN (синим цветом) и Si (красным цветом), а также отмечена дислокация несоответствия. Введение дислокаций несоответствия объясняет снижение кристаллического качества зародышевых слоев AlN, регистрируемых методами рентгеновской дифракции и рамановской спектроскопии, при понижении температуры нитридации с $900 \text{ }^\circ\text{C}$ до $700 \text{ }^\circ\text{C}$, но, исходя из полученных с помощью ПЭМ данных, позволяет снизить напряжения в слое AlN. Измеренное значение постоянной решетки по расстоянию между рефлексами, полученными от зародышевого слоя AlN вдоль желтой линии из FFT ПЭМ изображений (см. рисунок 37б), составило $3,13 \pm 0,01 \text{ \AA}$, что также коррелирует со значением $3,12 \text{ \AA}$ для недеформированного AlN.

Таким образом, с помощью метода ПЭМ высокого разрешения с применением FFT анализа ПЭМ изображений показано, что наличие включений аморфной фазы Si_3N_4 в границе интерфейса AlN/Si вносит растягивающие напряжения в зародышевый слой AlN . Снижение температуры нитридации приводит к уменьшению количества аморфной фазы Si_3N_4 на интерфейсе AlN/Si , что способствует снижению растягивающих напряжений в слое AlN . Оценка параметров латеральной решетки зародышевых слоев AlN , выращенных на поверхности Si при различных температурах нитридации и содержащих различные интерфейсы $\text{AlN}/\text{amorph-Si}_3\text{N}_4/\text{Si}$, $\text{AlN}/\text{SiN}(8\times 8)/\text{Si}$ и AlN/Si , коррелирует с оценками значений напряжений в слоях AlN , полученными методом КРС. Данные результаты наглядно демонстрируют, что одной из причин возникновения трещин в слоях III-нитридов, выращенных на кремниевых подложках, является образование на границе раздела AlN/Si большого количества аморфной фазы Si_3N_4 , которая приводит к росту растянутых слоев AlN , что характерно для нитридации кремния при повышенных температурах ($> 700\text{ }^\circ\text{C}$) [A5].

3.4 Влияние ростовых условий GaN на токи утечки в буферных слоях GaN-на-Si

Дальнейшие исследования были сосредоточены на поисковых исследованиях, направленных на повышение пробивного напряжения и снижения токов утечки в слоях GaN путём варьирования ростовой температуры, обуславливающей изменение концентрации доноров, включая фоновые примеси и доноро-подобные дефекты в слоях GaN-on-Si, выращиваемых методом NH_3 -МВЕ.

В подразделе 3.1 диссертационной работы сообщается, что при росте слоёв GaN методом NH_3 -МВЕ существует температурное окно роста, позволяющее получать пригодные для приборных применений слои GaN с точки зрения морфологии поверхности [A2]. На рисунке 38 приведены АСМ

изображения поверхности свободных от трещин слоёв GaN-на-Si, выращенных при оптимальной (800 °С), низкой (750 °С) и высокой (850 °С) температурах роста.

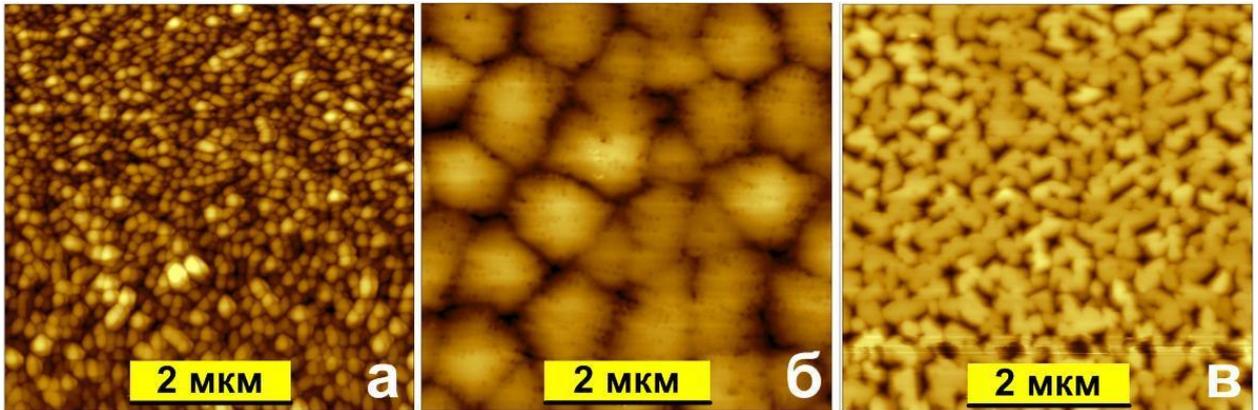


Рисунок 38 – АСМ изображения поверхностей слоёв GaN толщиной 1000 нм размером 5×5 мкм² выращенных при различных температурах роста:

a – 750 °С (Z-контраст = 100 нм), *б* – 800 °С (Z-контраст = 20 нм),

в – 850 °С (Z-контраст = 100 нм)

Для исследования влияния температуры роста на компенсацию донорных и акцепторных примесей и дефектов в выращиваемых методом NH_3 -МВЕ слоях GaN-на-Si далее исследовались образцы, выращиваемые при температурах роста слоёв GaN около 800 °С (а именно 775, 800 и 825 °С). Процесс предэпитаксиальной подготовки подложек Si был описан в предыдущем подразделе главы 3. Нитридизация подложки проводилась при температуре 700 °С в потоке аммиака 1 норм. см³/мин. Низкая температура нитридации способствует минимизации образования островков аморфного SiN [A5], что уменьшает величину растягивающих напряжений в плёнке и препятствует растрескиванию выращиваемых далее слоёв GaN-на-Si [A4]. После нитридации кремниевой подложки выращивался зародышевый слой AlN толщиной 50 нм, а затем буферный слой, состоящий из 160 нм AlN, 160 нм $\text{Al}_{0,6}\text{GaN}$ и 160 нм $\text{Al}_{0,3}\text{GaN}$. Подобная конструкция буферного слоя препятствует растрескиванию слоёв GaN-on-Si при охлаждении и позволяет получать слои GaN с плотностью дислокаций $\sim 10^9$ [A4]. На заключительном этапе роста гетероструктур GaN-на-Si выращивались слои GaN толщиной

1000 nm при выбранных температурах (775, 800 и 825 °C) в потоке аммиака 200 норм. см³/мин со скоростью роста 600 нм/ч. Далее по тексту образцы исследуемой серии обозначены как «GaN-775», «GaN-800», «GaN-825».

Результаты контроля морфологии поверхности выращенных образцов приведены на рисунке 39. Из рисунка видно, что образец «GaN-800» (рисунок 39б), имеет характерную для данных ростовых условий морфологию поверхности, представляющую из себя гексагональную холмистую структуру практически без растратов. На поверхности образца «GaN-825» (рисунок 39в), несмотря на увеличение температуры роста всего на 25 °C, наблюдается начальная стадия формирования термических растратов глубиной около 20 нм. При этом, гексагональная холмистая структура всё ещё хорошо различима, морфология образца кардинально отличается от морфологии слоёв GaN, приведённой на рисунке 37в. Образец «GaN-775» (рисунок 39а) также демонстрирует наличие гексагональной холмистой структуры, морфология образца кардинально отличается от морфологии слоёв GaN, приведённой на рисунке 37а, однако на поверхности присутствуют плато диаметром около 1 мкм и высотой порядка 40 нм. Как уже говорилось, подобного рода плато на поверхности слоёв AlN-на-Si исследовались в работе И.А. Милёхиным и др. [99]. Данные объекты являются инверсионными доменами (ID), которые представляют собой материал азотной полярности. Из литературы известно, что в N-полярных слоях GaN концентрация кислорода достигает значений на порядок выше, чем в Ga-полярном материале [104, 105]. Таким образом, данное наблюдение может являться причиной большей концентрации доноров в образце «GaN-775», и соответственно поясняет снижение сопротивления слоя GaN при понижении температуры роста. Несмотря на то, что более низкая температура роста должна способствовать уменьшению количества встраиваемого в процессе роста кислорода, наличие инверсионных доменов в плёнке обеспечивает возрастание суммарного количества кислорода в плёнке по сравнению с образцами «GaN-800» и «GaN-825». Помимо этого, границы

раздела между ID и матрицей GaN Me-полярности окружены «шубой» из дислокаций, которые так же могут давать вклад в проводимость образца «GaN-775» [106].

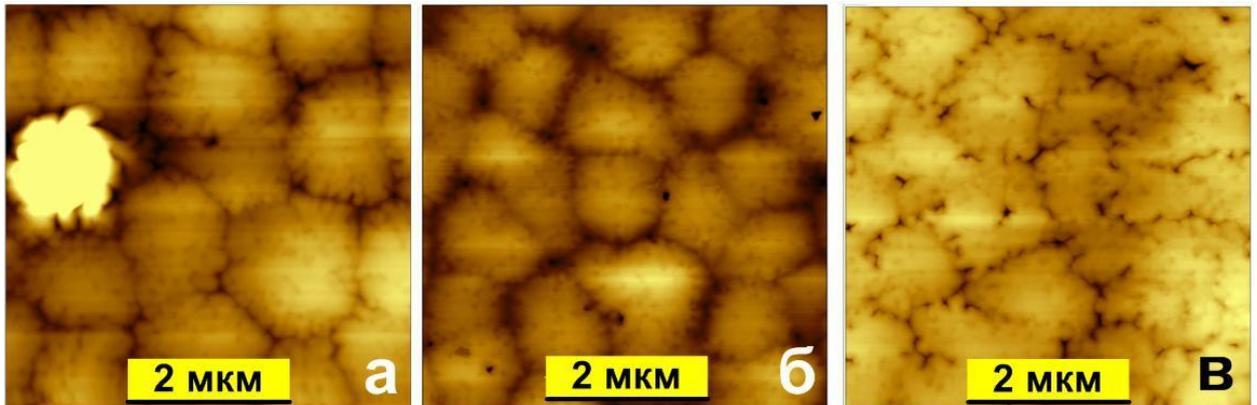


Рисунок 39 – АСМ изображения поверхностей слоёв GaN толщиной 1000 нм размером 5×5 мкм² (Z-контраст = 35 нм), выращенных при различных температурах роста: *а* – 775 °С, *б* – 800 °С, *в* – 825 °С.

Утечки в выращенных слоях GaN-на-Si измерялись при помощи анализатора параметров полупроводниковых приборов Agilent B1500A с использованием ручной зондовой станции Cascade M150. Для измерения токов утечек на выращенных гетероструктурах при помощи фотолитографии изготавливались контакты размером 1×1 мм² и промежутком между ними 5 мкм. Области гетероструктуры, находящиеся вне контактов и 5-ти микронного промежутка, удалялись на всю глубину слоя GaN при помощи плазмохимического травления. Для этого использовалась маска, состоящая из слоя SiO₂ и хрома, травление производилось на установке Oxford PlasmaLab100 в среде BCl₃:Ar:N₂ [107]. Затем методом взрывной фотолитографии формировались контакты Ti/Au. После напыления контакты подвергались быстрому отжигу в течении 30 с до температуры 800 °С в атмосфере азота. Схематичный вид образцов используемых для измерений токов утечки приведен на рисунке 40. Измеренные зависимости плотности тока (на единицу ширины контакта) от напряженности электрического поля в исследуемых образцах гетероструктур представлены на рисунке 41.

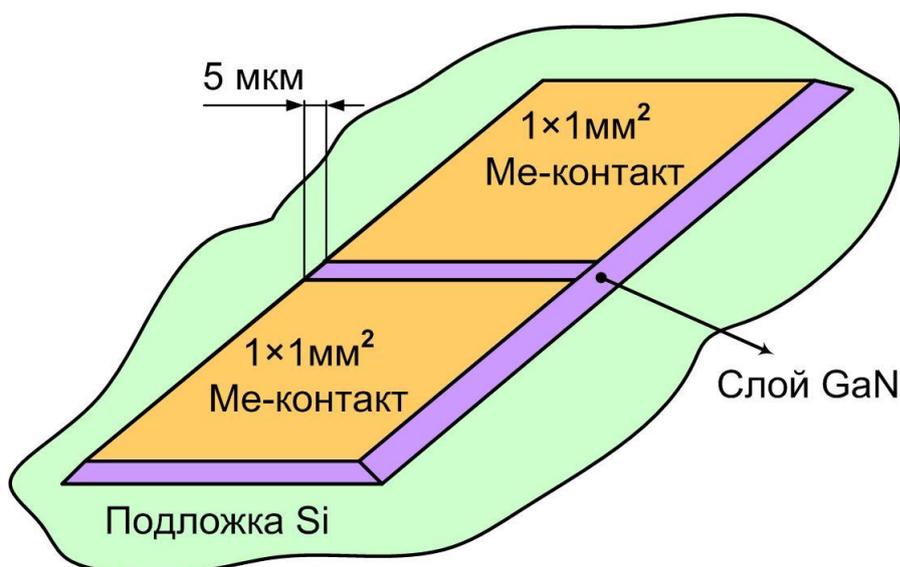


Рисунок 40 – Схематичный вид образцов для измерений полевых зависимостей токов утечек

Расстояние между омическими контактами (условная длина канала), которые представляют собой площадки размерами $1 \times 1 \text{ мм}^2$, составляло 5 мкм, а, соответственно, ширина «канала» утечек 1 мм. Из рисунка 41 видно, что наибольшие токи утечки характерны для образца «GaN-775», плотность тока 1 мА/мм достигается при напряженности электрического поля 8,3 кВ/см. Для образца «GaN-800» плотность тока около 1 мА/мм достигается при напряженности электрического поля 25 кВ/см, а для образца «GaN-825» плотность тока 1 мА/мм наблюдается при еще большем поле 41 кВ/см.

Для всех трех образцов полученные токи утечки по величине на 2-4 порядка меньше токов утечки в буферном слое GaN, выращенном на полуизолирующем GaN-шаблоне (template), легированном железом [107]. В этом случае токи утечки достигали величины $4 \times 10^{-2} \text{ А/мм}$ для низкого поля 6,7 кВ/см. В этой работе большие токи утечки объяснялись появлением проводящего канала на границе раздела GaN–template и эпитаксиально выращенного слоя GaN из-за повышенной концентрации (наряду с углеродом) и мелких доноров, кислорода и кремния, на исходной поверхности роста. Плотность токов утечки снизилась более чем на 7 порядков при использовании тонкого слоя AlN при старте роста. Согласно

объяснению авторов, данный эффект достигается благодаря появлению «обратного барьера» (наклона) для носителей в зоне проводимости и дополнительного тонкого, но высокого барьера, обусловленного вставкой более широкозонного слоя AlN.

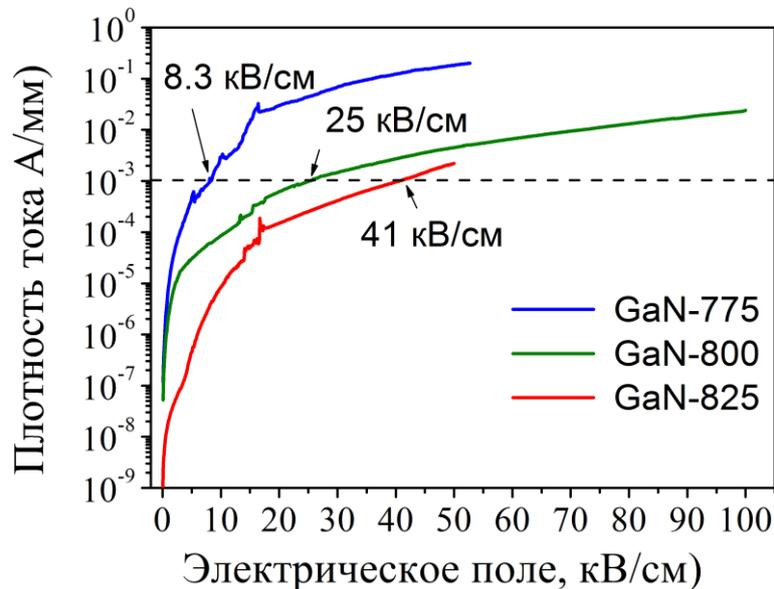


Рисунок 41 – Измеренные полевые зависимости плотности тока (на единицу ширины контакта) для исследуемых слоёв GaN-на-Si; пунктирная линия показывает уровень утечек 1 мА/мм

В работе [106] повышенная плотность токов утечки, достигающих 0.5 А/мм для поля 100 кВ/см объяснялась увеличенной плотностью дислокаций. Наименьшие токи утечки были получены в работе [108] для намеренно компенсированного углеродом буферного слоя GaN, выращенного на кремнии. В этой работе был достигнут уровень плотности тока в 1 мА/мм для напряженности поля 731 кВ/см, а плотность тока 1 мкА/мм наблюдалась при напряженности поля 383 кВ/см. Ранее для гетероструктур GaN на сапфире автором диссертационной работы с коллегами были достигнуты значения плотности тока утечки 2,5 мкА/мм при напряженности электрического поля 800 кВ/см [109].

В работе [110] исследовано влияние компенсирующей примеси углерода на токи утечки через GaN буфер в гетероструктурах AlGaIn/GaN

при различных уровнях легирования. Интересно сопоставить полученные результаты с результатами данной работы, поскольку в ней образцы то же выращивались методом NH_3 -МВЕ на подложках кремния с близкими по конструкции и условиям роста зародышевыми и буферными слоями, используемыми авторами для снижения механических напряжений, за исключением собственно легирования углеродом (из потока CBr_4) эпитаксиального слоя GaN. Полученные плотности токов утечки в исследуемых Равикираном с коллегами гетероструктурах GaN-на-Si составили 1 мА/мм для нелегированного слоя и 0,5 мА/мм и 0,03 мА/мм для легированных углеродом слоёв GaN-на-Si, при напряженности электрического поля 40 кВ/см. Таким образом, авторами работы [110] было продемонстрировано снижение тока утечек вдвое в легированных углеродом слоях GaN при потоке CBr_4 ($\text{ВЕР}=6.2 \times 10^{-8}$ мТорр), а максимальный эффект, т.е. снижение утечек в 30 раз в сравнении с намеренно нелегированными слоями GaN при потоке CBr_4 ($\text{ВЕР}=18.6 \times 10^{-8}$ мТорр).

Проведённые исследования влияния ростовой температуры на токи утечки в слоях GaN-на-Si, выращиваемых методом NH_3 -МВЕ, внутри технологически приемлемого диапазона ростовых температур ($750^\circ\text{C} < T_s < 850^\circ\text{C}$), позволяющего выращивать слои GaN с приборно-пригодной морфологией поверхности, позволили установить, что низкая температура роста (775°C) приводит к формированию в слоях GaN-на-Si инверсионных доменов. В результате чего слои GaN-на-Si выращенные при 775°C характеризуются максимальным током утечки (1 мА/мм при напряженности поля 8,3 кВ/см). Повышение температуры роста приводит к возрастанию сопротивления слоёв GaN. Минимальные значения токов утечки (1 мА/мм при напряженности поля 41,0 кВ/см) в слоях GaN-on-Si, были получены при температуре роста 825°C . Дальнейшее снижение токов утечки в слоях GaN-на-Si, выращиваемых методом NH_3 -МВЕ, требует преднамеренного легирования акцепторами. Следует отметить, что, не смотря на то, что наибольшим сопротивлением из исследуемых образцов

GaN-на-Si, обладает образец, выращенный при температуре роста 825 °С, наличие на его поверхности растратов глубиной около 20 нм, ставит под сомнение возможность использования данной температуры роста при формировании ГЭС с 2DEG. Однако достигнутая плотность тока 1 мА/мм при напряженности поля 25 кВ/см, полученная для слоёв GaN-на-Si, выращенных при температуре 800 °С, указывает на возможность надежной работы транзистора при стандартном, для СВЧ-применения, напряжении 28 В.

Глава 4 Сравнение электрофизических параметров ГЭС с 2DEG, выращенных на подложках кремния и сапфира

Подложки лейкосапфира ($\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$) и кремния ($\text{Si}(111)$) широко применяются для роста AlGaN/GaN гетероструктур с 2DEG для исследований электрофизических параметров 2DEG и создания HEMT [111–113]. Различные значения параметров решёток данных материалов приводят к возникновению различных значений плотностей дислокаций в выращиваемых на них слоях GaN, что оказывает влияние на параметры 2DEG и на электрофизические параметры HEMT транзисторов. Комплексное исследование влияния плотности дислокаций в слоях GaN на параметры 2DEG подробно исследовалось в работе [65]. Подобный подход даёт исчерпывающее представление о влиянии плотности дислокаций на параметры 2DEG. Однако сравнить электрофизические параметры 2DEG, полученные разными исследовательскими группами на подложках кремния и сапфира, между собой представляется затруднительным, поскольку использование различных методов роста и ростовых условий, а также конструкций буферного слоя оказывает разное влияние на морфологию поверхности и плотность дислокаций в выращиваемых слоях GaN. В данной части диссертационной работы было проведено сравнение структурных свойств слоёв GaN и электрофизических параметров 2DEG в AlGaN/GaN гетероструктурах, выращенных методом NH_3 -МВЕ на подложках $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ и $\text{Si}(111)$ с использованием одинаковых конструкций буферного слоя и выращенных в одинаковых ростовых условиях.

Условия предэпитаксиальной подготовки и нитридации подложек сапфира и кремния были подробно описаны в разделах 3.1 и 3.2 диссертационной работы. В качестве буферного слоя в данных исследованиях была выбрана конструкция из трёх пар чередующихся слоев AlN и GaN толщиной по 80 нм для подавления растрескивания выращиваемых слоёв GaN на подложках $\text{Si}(111)$. Слои AlN выращивались при температуре подложки

960 °С в потоке аммиака 60 норм. см³/мин со скоростью роста 0,25 мкм/ч, а слой GaN при температуре подложки 800 °С в потоке аммиака 200 норм. см³/мин со скоростью роста 0,5 мкм/ч. Поскольку, при температуре роста AlN в условиях высокого вакуума слой GaN подвергаются термическому травлению, рост слоёв AlN на поверхности GaN начинался при температуре подложки 800 °С в потоке аммиака 200 норм. см³/мин. Далее производились изменения условий роста, до ростовой температуры и потока аммиака соответствующих росту структурно совершенного слоя AlN. Фотографии поверхности слоев GaN-на-Si, выращенных с использованием буфера с чередующимися слоями AlN и GaN, полученные с помощью оптического микроскопа, приведены на рисунке 42. Из изображений видно, что слой GaN свободны от трещин.

Для того, чтобы исключить влияние конструкции буферного слоя на плотность дислокаций в активном слое GaN и выявить влияние самих подложек на плотность дислокаций в слоях GaN, ГЭС с 2DEG выращивались на подложках Al₂O₃(0001) и Si(111) с использованием одинаковой конструкции буферного слоя, препятствующей растрескиванию нитридных слоёв при росте на подложках Si(111).

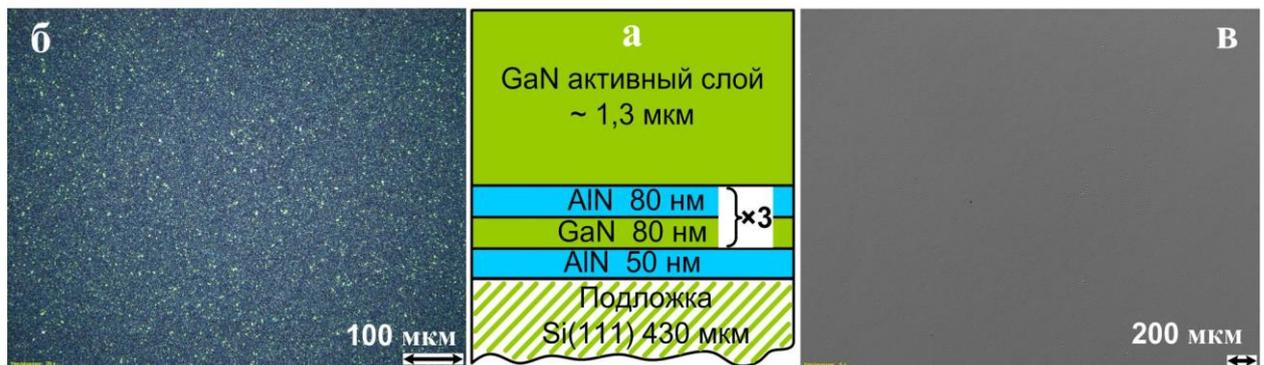


Рисунок 42 – В центре рисунка приведена конструкция буферных слоёв ГЭС, выращенной на подложке Si(111) с чередующимися буферными слоями AlN и GaN; справа и слева приведены изображения поверхности свободного от трещин GaN: б – в режиме тёмнопольной съёмки, в – в режиме интерференционного контраста

Ранее в тексте диссертации сообщалось об оптимальных условиях (температура роста 800 °С при потоке аммиака 200 норм. см³/мин) роста слоёв GaN с гладкой морфологией поверхности (RMS < 5 нм), пригодных для создания резких гетерограниц методом NH₃-МВЕ [А2, А3]. Для исследования структурных свойств слоёв GaN после реализации конструкции буферного слоя с чередующимися слоями AlN и GaN на подложках Al₂O₃(0001) и Si(111) выращивался слой GaN толщиной ~ 1300 нм при температуре роста 800 °С и потоке аммиака 200 норм. см³/мин. Дифракционные картины, от поверхностей слоёв GaN/Al₂O₃(0001) и GaN/Si(111) имели отражательный характер, что свидетельствует о гладкой морфологии выращенных слоёв. В процессе охлаждения подложки ниже температур 450 °С в потоке аммиака 20 норм. см³/мин на поверхности проявлялась реконструкция (2×2), указывающая на металлическую полярность А₃-нитридных слоев [114]. Примеры характерных дифракционных картин от поверхности слоёв GaN с реконструкцией (2×2) приведены на рисунке 43.

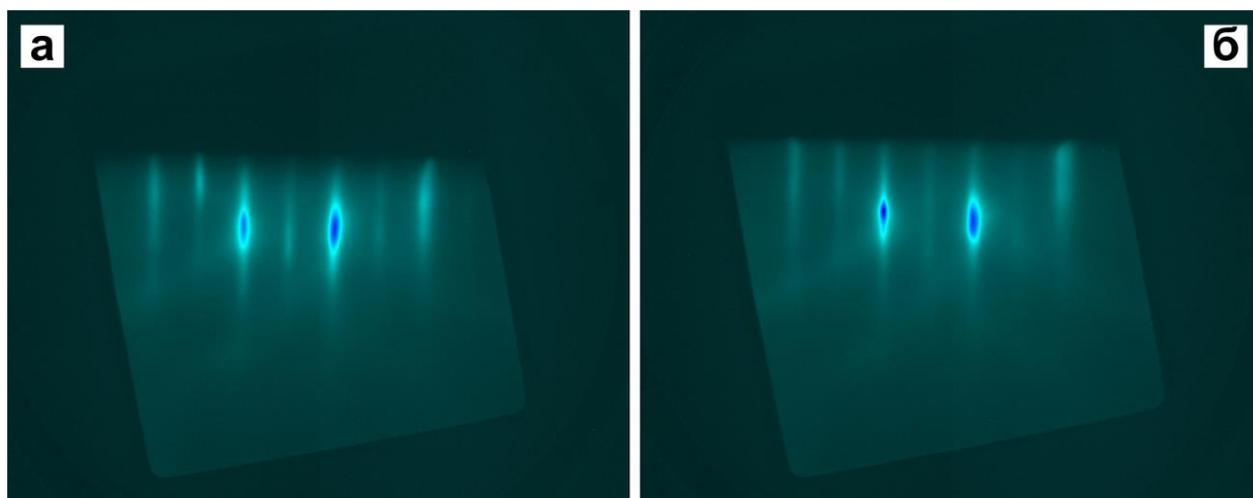


Рисунок 43 – Дифракционные картины, полученные от поверхности слоёв GaN выращенных на различных подложках при температуре подложки 450 °С и потоке аммиака 20 норм. см³/мин: *а* – Al₂O₃(0001), *б* – Si(111)

Морфология слоёв GaN, выращенных на подложках Al₂O₃(0001) и Si(111) контролировалось *ex situ* с помощью метода АСМ. Изображения поверхности слоёв GaN представлены на рисунке 44. Одинаковый характер

морфологии слоёв GaN, выращенных на сапфировой и кремниевой подложках, даёт основание полагать, что рассеяние носителей заряда на шероховатостях гетерограниц будет давать одинаковый вклад в суммарное рассеяние носителей заряда в формируемых ГЭС с 2DEG.

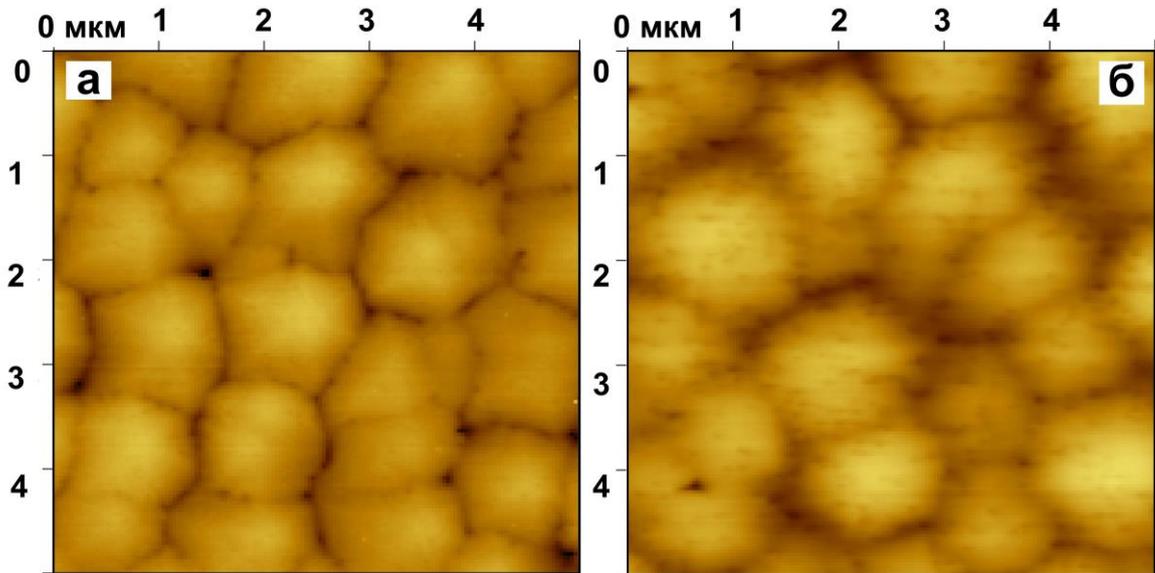


Рисунок 44 – АСМ-изображения размером 5×5 мкм² (Z-контраст = 30 нм) морфологии поверхности слоёв GaN, выращенных при температуре роста 800 °С и потоке аммиака 200 норм. см³/мин на: *a* – Al₂O₃(0001), *б* – Si(111)

Кристаллическое качество слоев GaN оценивалось методом ДРЛ из измерений ПШПВ рентгеновских рефлексов. Измерялись ПШПВ симметричного рефлекса (0002), отражающего микро-разориентации плоскостей 0001 из-за дефектов, в основном, вертикальных винтовых дислокаций (ρ_{screw}), и ПШПВ кососимметричного рефлекса (10-15), которая чувствительна к смещениям, в частности, из-за наличия вертикальных краевых и смешанного типа дислокаций (ρ_{edge}). Плотности дислокаций рассчитывались по формуле для хаотически распределенных дислокаций [115]. Полученные в ходе измерений кривые качания приведены на рисунке 45. Измеренные значения ПШПВ симметричного рефлекса демонстрируют высокое кристаллическое качество кремниевых и сапфировых подложек (35 угл. с у Si(111) и 24 угл. с у Al₂O₃(0001)). Значения ПШПВ симметричного

(0002) и кососимметричного (10-15) рефлексов для GaN и входящих в конструкцию буфера слоёв AlN, а также рассчитанные по данным дифракции рентгеновских лучей значения плотности дислокаций приведены в таблице 3. Из таблицы 3 видно, что кривые качания, полученные для слоёв GaN и AlN, выращенных на подложках Al₂O₃(0001) имеют более узкие пики, чем у слоёв, выращенных на подложках Si(111). Данное различие связано с большим рассогласованием параметров кристаллической решётки A₃-нитридов с Si(111) по сравнению с Al₂O₃(0001), и как следствие, большей плотностью дислокаций в ГЭС, выращиваемых на подложках Si(111). Используя данные симметричных отражений (0002) из условия Брэгга-Вульфа, были рассчитаны межплоскостные расстояния (0001) (параметр решетки a_c) в направлении перпендикулярном поверхности.

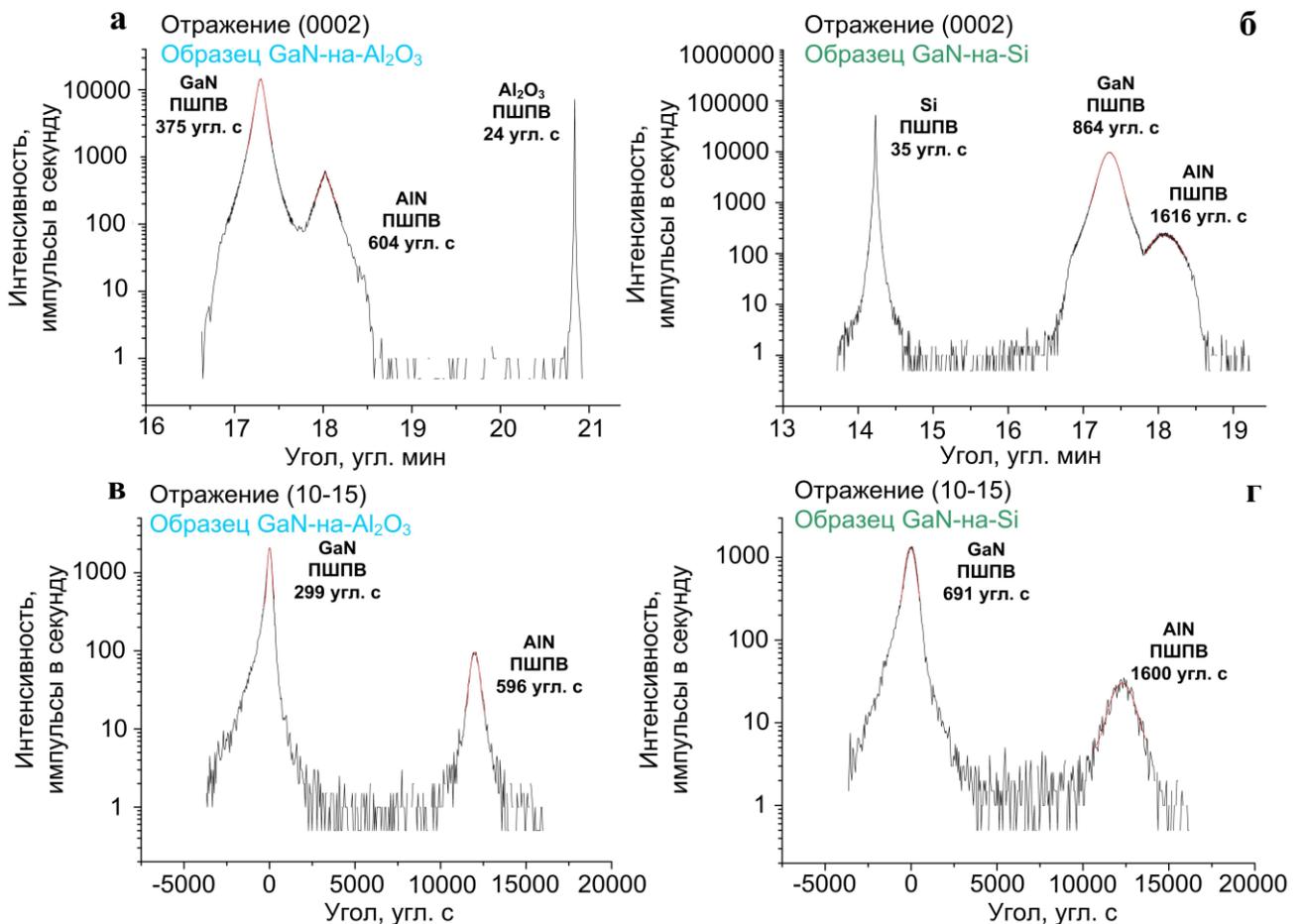


Рисунок 45 – Кривые качания ГЭС, выращенных на подложках:

а, в – сапфира, б, г – кремния.

Для образца GaN/Si(111) угол Брэгга составил $17,348^\circ$, что соответствует значению $a_c = 5,166 \text{ \AA}$, а для образца GaN/Al₂O₃(0001) угол Брэгга составил $17,292^\circ$, что соответствует значению $a_c = 5,183 \text{ \AA}$. Из сравнения полученных значений с параметром кристаллической решетки GaN в свободном состоянии ($a_c = 5,178 \text{ \AA}$), можно определить характер остаточных напряжений в плёнках GaN. Кристаллическая решетка пленки GaN/Si(111) сжата в направлении перпендикулярном поверхности и, соответственно, растянута в латеральном направлении, кристаллическая решетка пленки GaN/Al₂O₃(0001), наоборот, растянута в направлении перпендикулярном поверхности, а значит, сжата в латеральном направлении.

Таблица 3 – Данные ПШПВ и значения плотности вертикальных винтовых, краевых и смешанного типа дислокаций для слоёв GaN, выращенных на подложках Al₂O₃(0001) и Si(111)

Характеристика	Подложка Si(111)	Подложка Al ₂ O ₃ (0001)
ПШПВ (0002) GaN	864 угл. с	375 угл. с
$\rho_{\text{screw}} \text{ GaN}$	$1,7 \times 10^9 \text{ см}^{-2}$	$3,2 \times 10^8 \text{ см}^{-2}$
ПШПВ (0002) AlN	1616 угл. с	604 угл. с
$\rho_{\text{screw}} \text{ AlN}$	$6,0 \times 10^9 \text{ см}^{-2}$	$8,4 \times 10^8 \text{ см}^{-2}$
ПШПВ (10-15) GaN	691 угл. с	299 угл. с
$\rho_{\text{edge}} \text{ GaN}$	$1,1 \times 10^9 \text{ см}^{-2}$	$2,1 \times 10^8 \text{ см}^{-2}$
ПШПВ (10-15) AlN	1600 угл. с	596 угл. с
$\rho_{\text{edge}} \text{ AlN}$	$5,9 \times 10^9 \text{ см}^{-2}$	$8,1 \times 10^8 \text{ см}^{-2}$

Дальнейшая характеристика выращенных слоёв GaN осуществлялась путём сравнительного анализа спектров ФЛ и определения остаточных упругих напряжений в эпитаксиальных слоях GaN.

Положение максимума полосы фотолюминесценции свободного экситона в GaN при низкой температуре (4 К) для GaN составляет 3,478 эВ [116, 117]. Энергия экситонного перехода ниже ширины запрещенной зоны

GaN ($E_g=3,503$ эВ при 4 К), и отличается от неё на энергию связи экситона, которая составляет 0,025 эВ для экситона типа А. Зависимость ширины запрещенной зоны GaN от температуры можно аппроксимировать эмпирическим выражением: $E_g(T)=E_g(0)+\alpha T^2/(T-\beta)$. Согласно работе [117] значения коэффициентов $\alpha =5,08\cdot 10^{-4}$ эВ/К и $\beta=996$ К, а ширина запрещенной зоны GaN при комнатной температуре $E_g(295\text{ К}) = 3,440$ эВ. С учетом энергии связи экситона положение максимума полосы фотолюминесценции свободного экситона при температуре 295 К для GaN составляет 3,415 эВ.

Биаксиальное сжатие в плоскости (0001) приводит к увеличению энергии кванта экситонного перехода с линейным коэффициентом $\frac{\partial E_{gA}}{\partial \varepsilon_{zz}}=14,3$ эВ [118], где ε_{zz} – диагональная компонента тензора деформации вдоль оси c . В случае биаксиального сжатия или растяжения компоненты тензора деформации вдоль оси c (ε_{zz}) и в плоскости перпендикулярной оси c ($\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$) связаны следующим соотношением $\varepsilon_{zz} = -\frac{2C_{13}}{C_{33}}\varepsilon_{xx}$, где C_{13} и C_{33} – компоненты тензора упругости. Положительные значения компоненты ε_{zz} соответствуют биаксиальному сжатию, отрицательные – биаксиальному растяжению. В случае биаксиального растяжения происходит пересечение энергетических уровней подзон дырок B и C и при деформации $\varepsilon_{zz} < -0,13\%$ [119] основной становится подзона дырок C с деформационным потенциалом $\frac{\partial E_{gC}}{\partial \varepsilon_{zz}}=28,8$ эВ, что приводит к увеличению наклона зависимости энергии кванта экситонного перехода от деформации.

Для сравнительного анализа фотолюминесценции и определения остаточных упругих напряжений в эпитаксиальных слоях GaN, выращенных методом МВЕ на различных подложках, проведены измерения спектров фотолюминесценции слоев GaN. На рисунке 46 показаны спектры фотолюминесценции слоев GaN на подложках $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ и $\text{Si}(111)$, измеренные при температуре 295 К. Возбуждение фотолюминесценции производилось четвертой гармоникой непрерывного Nd:YAG лазера с

энергией кванта 4,66 эВ. Мощность возбуждающего излучения составляла 14 мВт, диаметр лазерного пятна на образце – 0,5 мм. Спектры состоят из полосы краевой фотолюминесценции, доминирующей в которой при данной температуре является полоса свободного экситона, а также дефектной желтой полосы фотолюминесценции. Для GaN на подложках Si(111) из-за сильного различия коэффициентов преломления GaN и Si характерно влияние интерференции света на регистрируемый спектр, приводящее к периодической модуляции интенсивности излучения. Положение максимума полосы фотолюминесценции экситонного перехода составляет 3,40 эВ для GaN/Si(111) и 3,43 эВ для GaN/Al₂O₃(0001). Из этих данных были получены следующие значения компоненты тензора деформации ε_{zz} :

$\varepsilon_{zz} = -0,096\%$ для GaN/Si(111) (биаксиальное растяжение);

$\varepsilon_{zz} = 0,095\%$ для GaN/Al₂O₃(0001) (биаксиальное сжатие).

Полученные в ходе исследования выращенных на подложках сапфира и кремния слоёв GaN методами АСМ, ДРЛ и ФЛ результаты, наглядно демонстрируют отсутствие влияния остаточных механических напряжений на морфологию слоёв GaN, которая определяется исключительно ростовыми условиями.

Обзор экспериментальных и теоретических данных для различных дефектных полос в GaN приведен в работах [116, 119]. По положению и форме наблюдаемой желтой полосы ФЛ в исследуемых слоях GaN, эта полоса была идентифицирована как полоса YL1, связанная с переходом электрона из зоны проводимости на уровень (-1/0) примеси замещения углерода на месте азота. Интенсивность краевой фотолюминесценции при фиксированной температуре и мощности возбуждения зависит от концентраций и сечений захвата различных центров безызлучательной рекомбинации и их зарядовых состояний, определяемых положением уровня Ферми. Интегральная интенсивность полосы краевой люминесценции для GaN/Si(111) в 7 раз выше, чем для GaN/Al₂O₃(0001). Данное различие можно объяснить различной концентрацией центров безызлучательной рекомбинации в исследуемых

структурах, а также тем, что концентрация фоновой примеси кремния при росте на кремниевых подложках выше, что приводит к повышению уровня Ферми и заполнению уровней центров безызлучательной рекомбинации электронами.

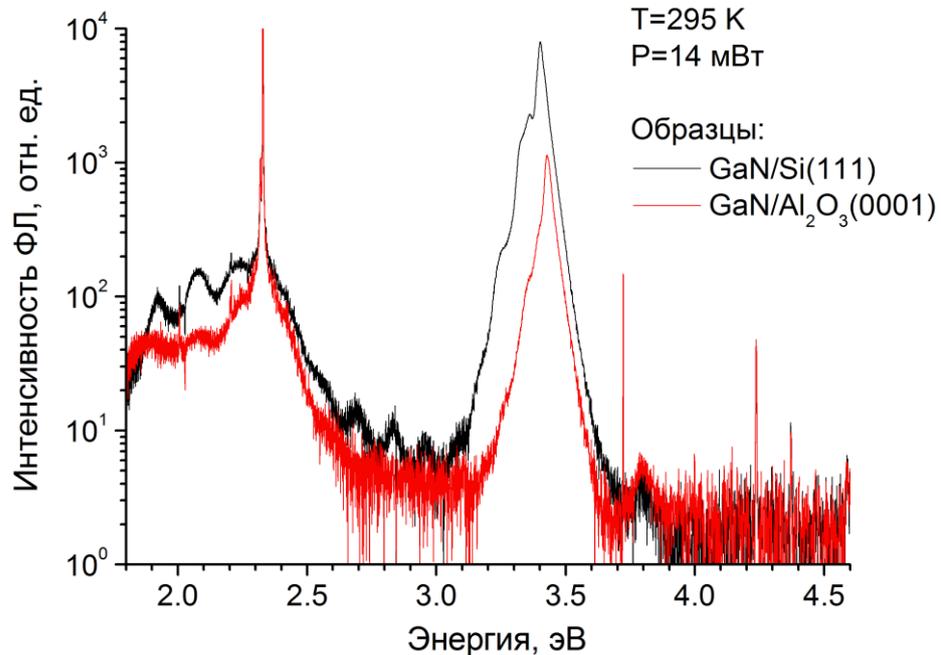


Рисунок 46 – Спектры ФЛ слоев GaN на подложках Si(111) и Al₂O₃(0001)

Для измерения электрофизических параметров 2DEG на подложках Al₂O₃(0001) и Si(111) были выращены тестовые AlGa_xN/GaN ГЭС. Толщина активного слоя GaN составляла около 1,3 мкм. Рост активного слоя GaN осуществлялся при температуре 800 °С и потоке аммиака 200 норм. см³/мин на буферной конструкции с чередующимися слоями AlN и GaN. В этих же ростовых условиях выращивался модификатор потенциального рельефа квантовой ямы – слой AlN толщиной 1 нм, барьерный слой Al_{0,28}Ga_{0,72}N толщиной 20 нм и защищающий от окисления «сар»-слой GaN толщиной 1,5 нм. Значения концентрации и подвижности электронов в 2DEG измерялись с помощью эффекта Холла. Для измерений методом Холла на ГЭС при помощи фотолитографии формировались холловские мостики. Омические контакты изготавливались напылением Ti/Au с последующим вжиганием в

нейтральной атмосфере, меза-структуры вытравливались с помощью плазмохимического травления в среде BCl_3 . Размеры и внешний вид изготовленных холловских мостиков представлены на рисунке 47. Результаты электрофизических измерений представлены в таблице 4.

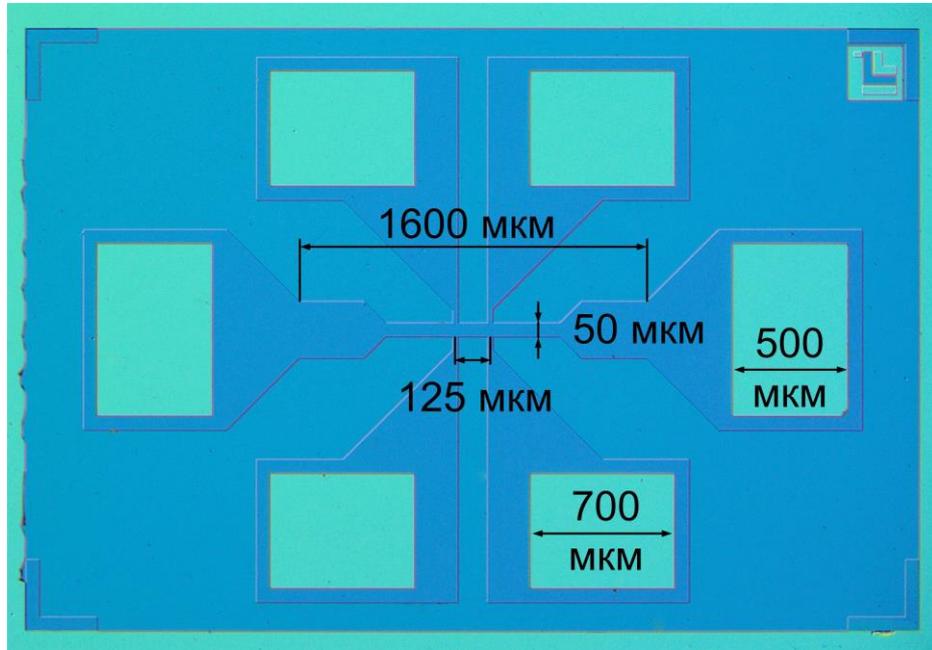


Рисунок 47 – Размеры и внешний вид холловских мостиков

Таблица 4 – Сравнение электрофизических параметров ГЭС с 2DEG, сформированных на подложках $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ и $\text{Si}(111)$

Подложка	Параметр	Тестовая пара №1	Тестовая пара №2
$\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$	R_s [Ω/\square]	365	391
	n [см^{-2}]	$1,08 \times 10^{13}$	$1,0 \times 10^{13}$
	μ [$\text{см}^2/\text{В} \times \text{с}$]	1590	1600
$\text{Si}(111)$	R_s [Ω/\square]	471	502
	n [см^{-2}]	$1,1 \times 10^{13}$	$1,0 \times 10^{13}$
	μ [$\text{см}^2/\text{В} \times \text{с}$]	1206	1244

Используемая, при проведении данных исследований, конструкция буфера с чередующимися слоями AlN и GaN позволила получать свободные от трещин слой GaN-на-Si толщиной более 1 мкм. ГЭС с использованием

данной буферной конструкции, выращенной на подложках $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ и $\text{Si}(111)$, в совокупности с ростом активного слоя GaN в одинаковых ростовых условиях, приводящих к идентичной морфологии поверхности, позволили провести сравнение влияния исключительно подложечного материала на кристаллическое качество и подвижность носителей заряда в 2DEG. По данным ДРЛ установлено, что плотность дислокаций в свободных от трещин слоях GaN, выращенных на кремниевой подложке, в 5 раз выше, чем в слоях GaN, выращенных на сапфировой подложке ($\sim 10^9 \text{ см}^{-2}$ для подложки $\text{Si}(111)$ и $\sim 10^8 \text{ см}^{-2}$ для подложки $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$). Полученные значения подвижности электронов в 2DEG, в выращенной по той же технологии ГЭС на сапфировой подложке ($\sim 1600 \text{ см}^2/\text{В}\times\text{с}$) выше на 30%, чем на кремниевой ($\sim 1200 \text{ см}^2/\text{В}\times\text{с}$) при концентрации двумерных электронов $(1,0-1,1)\times 10^{13} \text{ см}^{-2}$.

Заключение

В ходе выполнения диссертационной работы были получены следующие основные результаты:

1. Разработан оригинальный оптический метод контроля температуры на поверхности растущей плёнки, основанный на измерении спектров свечения нагретой подложки.

2. Продемонстрировано, что высокотемпературная нитридизация кремния приводит к увеличению остаточных растягивающих напряжений в зародышевых слоях AlN, из-за формирования на границе раздела AlN/Si аморфной фазы SiN.

3. Создана технология роста свободных от трещин слоёв GaN на кремниевых подложках (111) методом NH₃-МВЕ для приборных применений.

4. Определены три основные моды роста слоёв GaN, выращиваемых методом NH₃-МВЕ, соответствующие определённым ростовым условиям: нестабильный послойный рост, режим квазитечения ступеней, закручивающихся вокруг мест выхода прорастающих дислокаций и режим, характеризующийся локальным разложением GaN в местах выхода дислокаций на поверхность.

5. Установлено, что рост слоёв GaN при температуре роста ниже 800 °С методом NH₃-МВЕ может приводить к формированию в слое GaN инверсионных доменов, образование которых приводит к уменьшению сопротивления слоёв GaN.

6. Установлено, что остаточные механические напряжения не влияют на морфологию, выращиваемых слоёв GaN, которая определяется ростовыми условиями;

7. Проведено сравнение параметров 2DEG в гетероструктурах AlGaIn/GaN, выращенных с использованием одинаковых ростовых условий и с применением идентичных конструкций буферных слоёв на подложках кремния и сапфира. Продемонстрировано, что одинаковые ростовые условия приводят к формированию слоёв GaN со схожей морфологией поверхности, в результате чего установлено влияние подложечного материала на плотность прорастающих дислокаций и, как следствие, на параметры 2DEG.

Список основных обозначений и сокращений

ГЭС	гетероэпитаксиальная структура;
2DEG	двумерный электронный газ (two-dimensional electron gas);
A3-нитриды	нитриды металлов III группы: галлия, алюминия и индия;
HEMT	транзистор с высокой подвижностью электронов (<i>high-electron-mobility transistor</i>);
IGBT	биполярный транзистор с изолированным затвором (<i>insulated-gate bipolar transistor</i>);
SiC	карбид кремния;
Al ₂ O ₃	лейкосапфир;
Si	кремний;
GaN-на-Si	слои нитрида галлия на кремниевой подложке;
AlN-на-Si	слои нитрида алюминия на кремниевой подложке;
NH ₃ -MBE	аммиачная молекулярно-лучевая эпитаксия (<i>ammonia assisted molecular beam epitaxy</i>);
ДБЭО	дифракция быстрых электронов на отражение;
АСМ	атомно-силовая микроскопия;
ДРЛ	дифракция рентгеновских лучей;
ФЛ	фотолюминисценция;
КРС	комбинационное рассеяние света (Рамановская спектроскопия);
ПЭМ	просвечивающая электронная микроскопия;
СЭМ	сканирующая электронная микроскопия;
RMS	среднеквадратическое значение (root-means-square);
LDMOS	полевой планарный металл-оксид-полупроводниковый транзистор с боковой диффузией (<i>laterally-diffused metal-oxide semiconductor</i>);
MOSFET	транзистор по технологии металл-оксид-полупроводник с полевым эффектом (<i>metal-oxide-semiconductor field-effect</i>

	<i>transistor</i>);
МОСГФЭ	газофазная эпитаксия из металлоорганических соединений;
КТР	коэффициентов термического расширения;
PBN	пиролитический нитрид бора (<i>pyrolitic boron nitride</i>);
PG	пиролитический графит (<i>pyrolytic graphite</i>);
BCF	модель роста кристаллов Бартон–Кабреры–Франка (Burton–Cabrera–Frank model);
ДК	дифракционная картина;
ПШПВ	полная ширина на половине высоты;
FFT	быстрое преобразование Фурье (<i>fast fourier transform</i>);
ρ_{screw}	плотность вертикальных винтовых дислокаций;
ρ_{edge}	плотность вертикальных краевых и смешанного типа дислокаций;
ВЕР	давление эквивалентное потоку (<i>beam equivalent pressure</i>).

Список литературы

- [1] S.J. Pearton, C.R. Abernathy, M.E. Overberg, G.T. Thaler, A.H. Onstine, B.P. Gila, F. Ren, B. Lou and J. Kim «New applications advisable for gallium nitride», *Materials Today*, 5(6), 24-31 (2002). DOI: 10.1016/S1369-7021(02)00636-3.
- [2] А.Н. Ковалев «Транзисторы на основе полупроводниковых гетероструктур», Издательский дом МИСиС, Москва, с. 134 (2011).
- [3] Yaozong Zhong , Jinwei Zhang , Shan Wu , Lifang Jia , Xuelin Yang , Yang Liu , Yun Zhang, Qian Sun « A review on the GaN-on-Si power electronic devices» *Fundamental Research* 2, 462–475 (2022). 10.1016/j.fmre.2021.11.028.
- [4] Kevin J. Chen, Oliver Haberlen, Senior Member, Alex Lidow, Chun lin Tsai, Tetsuzo Ueda, Yasuhiro Uemoto, Yifeng Wu «GaN-on-Si Power Technology Devices and Applications» *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 64, No. 3, 779-795 (2017). 10.1109/TED.2017.2657579.
- [5] S.A. Kukushkin, A.M. Mizerov, A.V. Osipov, A.V. Redkov, S.N. Timoshnev «Plasma assisted molecular beam epitaxy of thin GaN films on Si(111) and SiC/Si(111) substrates: Effect of SiC and polarity issues» *Thin Solid Films* 646, 158–162 (2018). DOI: 10.1016/j.tsf.2017.11.037.
- [6] R. Lingaparthi, N. Dharmarasu, K. Radhakrishnan, M. Agrawal « In-situ stress evolution and its correlation with structural characteristics of GaN buffer grown on Si substrate using AlGaN/AlN/GaN stress mitigation layers for high electron mobility transistor applications» *Thin Solid Films* 708, 138128 (2020). DOI: 10.1016/j.tsf.2020.138128.
- [7] M. Tungare, V.K. Kamineni, F. Shahedipour-Sandvik, A.C. Diebold «Dielectric properties and thickness metrology of strain engineered GaN/AlN/Si(111) thin films grown by MOCVD» *Thin Solid Films* 519, 2929–2932 (2011). DOI: 10.1016/j.tsf.2010.12.079.
- [8] Cheng-Liang Wang, Jyh-Rong Gong, Wei-Tsai Liao, Chung-Kwei Lin, Tai-Yuan Lin «Deposition of AlGaIn films on (111) Si substrates and optimization of

- GaN growth on Si using intermediate-temperature AlGaIn buffer layers» *Thin Solid Films* 493, 135–138 (2005). DOI: 10.1016/j.tsf.2005.08.004.
- [9] J.W. Yu, H.C. Lin a, Z.C. Feng, L.S. Wang, S. Tripathy, S.J. Chua «Control and improvement of crystalline cracking from GaN thin films grown on Si by metalorganic chemical vapor deposition» *Thin Solid Films* 498, 108–112 (2006). DOI: 10.1016/j.tsf.2005.07.081.
- [10] N. Watanabe «GaN-on-Si technology for high-power transistors» *NTT Technical Review* 12 (4) (2014) pp. 1-6. <https://www.ntt-review.jp/archive/index.html>.
- [11] S.B. Lisesivdin, A. Yildiz, N. Balkan, M. Kasap, S. Ozcelik, E. Ozbay «Scattering analysis of two-dimensional electrons in AlGaIn/GaN with bulk related parameters extracted by simple parallel conduction extraction method» *Journal Applied Physics*, 108, 013712 (2010). DOI: 10.1063/1.3456008.
- [12] D. Jena, U.K. Mishra «Quantum and classical scattering times due to charged dislocations in an impure electron gas» *Physical Review B*, 66, 241307 (2002). DOI: 10.1103/PhysRevB.66.241307.
- [13] D.Yu. Protasov, T.V. Malin, A.V. Tikhonov, A.F. Tsatsulnikov, K.S. Zhuravlev «Electron scattering in AlGaIn/GaN heterostructures with a two-dimensional electron gas» *Semiconductors*, 47(1), 33-44 (2013). DOI: 10.1134/S1063782613010181.
- [14] M. Caliebe and F. Scholz, «Background Doping in Semipolar GaIn» *Annual Report Inst. Optoelectron., Ulm Univ., p. 23, (2016). www.uni-ulm.de › Jahresbericht › 2016 › UUlms-Opto-AR2016.*
- [15] P. Gamarra, C. Lacam, M. Tordjman, J. Splettstosser, B. Schauwecker, and M.-A. di Forte-Poisson, «Optimisation of a carbon doped buffer layer for AlGaInGaIn HEMT devices» *Journal of Crystal Growth*, 414, 232 (2015). DOI: 10.1016/j.jcrysgr.2014.10.025.
- [16] F. Schubert, S. Wirth, F. Zimmermann, J. Heitmann, T. Mikolajick, and S. Schmult «Growth condition dependence of unintentional oxygen incorporation in

epitaxial GaN» *Science and Technology Advanced Materials*, 17, 239 (2016). DOI: 10.1080/14686996.2016.1178565.

[17] Moore Gordon «No Exponential is Forever: But “Forever” Can Be Delayed!» *International Solid-State Circuits Conference (ISSCC) 2003 / SESSION 1 / PLENARY / 1.1* (2003). [cseweb.ucsd.edu > classes > slides > mooreISSCC03](http://cseweb.ucsd.edu/classes/slides/mooreISSCC03).

[18] O. Ambacher, J. Smart, J. R. Shealy, N. G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, W. J. Schaff, L. F. Eastman, R. Dimitrov, L. Wittmer, M. Stutzmann, W. Rieger, and J. Hilsenbeck «Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N- and Ga-face AlGaIn/GaN heterostructures» *Journal of Applied Physics*, 85, 3222 (1999). DOI: 10.1063/1.369664.

[19] R. Resta and D. Vanderbilt «Theory of polarization: A modern approach» In K. Rabe, C. Ahn, & J.-M. Triscone (Eds.), *Physics of Ferroelectrics: A Modern Perspective (Topics in Applied Physics)*, 105, 31-68 (2007). DOI: 10.1007/978-3-540-34591-6_2.

[20] R. Resta «Theory of the electric polarization in crystals» *Ferroelectrics*, vol. 136, pp. 51-55, (1992). DOI: 10.1080/00150199208016065.

[21] Spaldin, Nicola A. «A beginner's guide to the modern theory of polarization» *Journal of Solid State Chemistry* 195, 2-10, (2012). DOI: 10.1016/j.jssc.2012.05.010.

[22] R.D. King-Smith, D. Vanderbilt «Theory of polarization of crystalline solids» *Physical Review B*, 47, 1651–1654 (1993). DOI: 10.1103/PhysRevB.47.1651.

[23] R. Resta «Macroscopic Electric Polarization as a Geometric Quantum Phase» *Europhysics Letters*, 22, 133–138 (1993). DOI: 10.1209/0295-5075/22/2/010.

[24] D. Vanderbilt, R.D. King-Smith «Electric polarization as a bulk quantity and its relation to surface charge» *Physical Review B*, 48, 4442–4455, (1993). DOI: 10.1103/PhysRevB.48.4442.

[25] O. Ambacher, B. Foutz, J. Smart, J. R. Shealy, N. G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, A. J. Sierakowski, W. J. Schaff, L. F. Eastman, R. Dimitrov, A. Mitchell, and M. Stutzmann «Two dimensional electron gases induced by spontaneous and

- piezoelectric polarization in undoped and doped AlGa_N/Ga_N heterostructures» *Journal of Applied Physics* 87, 334-344 (2000). DOI: 10.1063/1.371866.
- [26] Fabio Bernardini and Vincenzo Fiorentini, David Vanderbilt «Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides» *Physical Review B*, 56(16), 10024-10027, (1997). DOI: 10.1103/PhysRevB.56.R10024.
- [27] J.P. Ibbetson, P.T. Fini, K.D. Ness, S.P. DenBaars, J.S. Speck, and U.K. Mishra «Polarization effects, surface states, and the source of electrons in AlGa_N/Ga_N heterostructure field effect transistors» *Applied Physics Letters*, 77, 250-252 (2000). DOI: 10.1063/1.126940.
- [28] Ram Chhavi Sharma, Raina Nandal, Nisha Tanwar, Reema Yadav, Jayant Bhardwaj and Aakash Verma «Gallium Arsenide and Gallium Nitride Semiconductors for Power and Optoelectronics Devices Applications» *Journal of Physics: Conference Series* 2426, 012008 (2023). DOI: 10.1088/1742-6596/2426/1/012008.
- [29] M. Asif Khan, J.N. Kuznia, J.M. Van Hove, D.T. Olson, S. Krishnankutty, and R.M. Kolbas «Growth of high optical and electrical quality Ga_N layers using low pressure metalorganic chemical vapor deposition» *Applied Physics Letters*, 58, 526 (1991). DOI: 10.1063/1.104575.
- [30] R. Gaska, J.W. Yang, A. Osinsky, Q. Chen, M. Asif Khan, A. O. Orlov, G. L. Snider, and M. S. Shur «Electron transport in AlGa_N-Ga_N heterostructures grown on 6H-SiC substrates» *Applied Physics Letters*, 72, 707 (1998). DOI: 10.1063/1.120852.
- [31] R. Gaska, M.S. Shur, A.D. Bykhovski, A.O. Orlov, and G.L. Snider, «Electron mobility in modulation-doped AlGa_N-Ga_N heterostructure» *Applied Physics Letters*, 74, 287-289 (1999). DOI: 10.1063/1.123001.
- [32] M.A. Littlejohn, J.R. Hauser, and T.H. Glisson «Monte Carlo calculation of the velocity-field relationship for gallium nitride» *Applied Physics Letters*, 26, 625 (1976). DOI: 10.1063/1.88002.

- [33] B. Gelmont, K.S. Kim, and M. Shur «Monte Carlo simulation of electron transport in gallium nitride» *Journal Applied Physics*, 74, 1818 (1993). DOI: 10.1063/1.354787.
- [34] C. Poblenz, A.L. Corrión, F. Recht, C.S. Suh, R. Chu, L. Shen, J.S. Speck, and U.K. Mishra «Power Performance of AlGa_N/Ga_N HEMTs Grown on SiC by Ammonia-MBE at 4 and 10 GHz» *IEEE Electron Device Letters*, 28, 11 (2007). DOI: 10.1109/LED.2007.907266.
- [35] Y. Cordier, F. Semond, P. Lorenzini, N. Grandjean, F. Natali, B. Damilano, J. Massies, V. Hoel, A. Minko, N. Vellas, C. Gaquiere, J.C. DeJaeger, B. Dessertene, S. Cassette, M. Surrugue, D. Adam, J-C. Grattapain, R. Aubry, S.L. Delage «MBE growth of AlGa_N/Ga_N HEMTS on resistive Si(1 1 1) substrate with RF small signal and power performances» *Journal of Crystal Growth*, 251, 811–815 (2003). DOI: 10.1016/s0022-0248(02)02149-8.
- [36] T. Palacios, A. Chakraborty, S. Rajan, C. Poblenz, S. Keller, S. P. DenBaars, J. S. Speck, and U. K. Mishra «High-power AlGa_N/Ga_N HEMTs for Ka-band applications» *Electron Device Letters*, 26(11), 781-783 (2005). DOI: 10.1109/LED.2005.857701.
- [37] J.W. Chung; W.E. Hoke; E.M. Chumbes; T. Palacios «AlGa_N/Ga_N HEMT With 300-GHz f_{max}» *IEEE Electron Device Letters*, 31(3), 195-197 (2010). DOI: 10.1109/LED.2009.2038935.
- [38] I.P. Smorchkova, L. Chen, T. Mates, L. Shen, S. Heikman, B. Moran, S. Keller, S.P. Den-Baars, J.S. Speck, and U.K. Mishra «AlN/Ga_N and (Al,Ga)_N/AlN/Ga_N two-dimensional electron gas structures grown by plasma-assisted molecular-beam epitaxy» *Journal Applied Physics*, 90, 5196–5201 (2001). DOI: 10.1063/1.1412273.
- [39] L. Hsu and W. Walukiewicz «Effect of polarization fields on transport properties in AlGa_N/Ga_N heterostructures» *Journal Applied Physics*, 89, 1783-1789 (2001). DOI: 10.1063/1.1339858.
- [40] O. Ambacher, B. Christian, M. Yassine, M. Baeumler, S. Leone, and R. Quay «Polarization induced interface and electron sheet charges of pseudomorphic

ScAlN/GaN, GaAlN/GaN, InAlN/GaN, and InAlN/InN heterostructures» *Journal of Applied Physics*, 129, 20 (2021). DOI: 10.1063/5.0049185.

[41] Y. Cao and D. Jena «High-mobility window for two-dimensional electron gases at ultrathin AlN/GaN heterojunctions» *Applied Physics Letters*, 90(18), 182112 (2007). DOI: 10.1063/1.2736207.

[42] A.M. Dabiran, A.M. Wowchak, A. Osinsky, J. Xie, B. Hertog, B. Cui, D.C. Look, and P.P. Chow «Very high channel conductivity in low-defect AlN/GaN high electron mobility transistor structures» *Applied Physics Letters*, 93(8), 082111 (2008). DOI: 10.1063/1.2970991.

[43] K.D. Chabak, D.E. Walker, M.R. Johnson, A. Crespo, A.M. Dabiran, D.J. Smith, A.M. Wowchak, S.K. Tetlak, M. Kossler, J.K. Gillespie, R.C. Fitch, and M. Trejo «High-performance AlN/GaN HEMTs on sapphire substrate with an oxidized gate insulator» *IEEE Electron Device Letters*, 32(12), 1677 (2011). DOI: 10.1109/LED.2011.2167952.

[44] T. Zimmermann, D. Deen, C. Yu, J. Simon, P. Fay, D. Jena, and H. G. Xing, “AlN/GaN insulated-gate HEMTs with 2.3 A/mm output current and 480 mS/mm transconductance,” *IEEE Electron Device Letters*, 29(7), 661–664 (2008). DOI: 10.1109/LED.2008.923318.

[45] D.A. Deen, D.F. Storm, D.J. Meyer, R. Bass, S.C. Binari, T. Gougousi, and K.R. Evans «Impact of barrier thickness on transistor performance in AlN/GaN high electron mobility transistors grown on free-standing GaN substrates» *Applied Physics Letters*, 105, 093503 (2014). DOI: 10.1063/1.4895105.

[46] Peng Cui, Andrew Mercante, Guangyang Lin, Jie Zhang, Peng Yao, Dennis W. Prather, and Yuping Zeng, «High-performance InAlN/GaN HEMTs on silicon substrate with high $f_T \times L_g$ » *Applied Physics Express* 12, 104001 (2019). DOI: 10.7567/1882-0786/ab3e29.

[47] A.V. Sakharov, W.V. Lundin, E.E. Zavarin, D.A. Zakheim, S.O. Usov, A.F. Tsatsulnikov, M.A. Yagovkina, P.E. Sim, O.I. Demchenko, N.Y. Kurbanova, L.E. Velikovskiy «Ultrathin barrier InAlN/GaN heterostructures for HEMTs» *Semiconductors*, 52(14), 1843–1845 (2018). DOI: 10.1134/S1063782618140257.

- [48] J. Kuzmik «Power electronics on InAlN/(In)GaN: Prospect for a record performance», *IEEE Electron Device Letters*, 22(11), 510–512 (2001). DOI: 10.1109/55.962646.
- [49] J. Kuzmik «InAlN/(In)GaN high electron mobility transistors: Some aspects of the quantum well heterostructure proposal» *Semiconductor Science and Technology*, 17(6), 540–544 (2002). DOI: 10.1088/0268-1242/17/6/307.
- [50] J. Kuzmik, A. Kostopoulos, G. Konstantinidis, J.-F. Carlin, A. Georgakilas, and D. Pogany «InAlN/GaN HEMTs: A first insight into technological optimization» *IEEE Transition Electron Devices*, 53(3), 422–426 (2006). DOI: 10.1109/TED.2005.864379.
- [51] F. Medjdoub, J.-F. Carlin, M. Gonschorek, E. Feltin, M. A. Py, D. Ducatteau, C. Gaquiere, N. Grandjean, and E. Kohn «Can InAlN/GaN be an alternative to high power/high temperature AlGaIn/GaN devices?» *International Electron Devices Meeting, San Francisco, CA, USA*, 1–4 (2006). DOI: 10.1109/IEDM.2006.346935.
- [52] F. Medjdoub, M. Alomari, J.-F. Carlin, M. Gonschorek, E. Feltin, M. A. Py, N. Grandjean, and E. Kohn, «Barrier-layer scaling of InAlN/GaN HEMTs» *IEEE Electron Device Letters*, 29(5), 422–425 (2008). DOI: 10.1109/led.2008.919377.
- [53] Remziye Tulek, Aykut Ilgaz, Sibel Gokden, Ali Teke, Mustafa K. Ozturk, Mehmet Kasap; Suleyman Ozcelik, Engin Arslan, Ekmel Ozbay «Comparison of the transport properties of high quality AlGaIn/AlN/GaN and AlInN/AlN/GaN two-dimensional electron gas heterostructures» *Journal of Applied Physics*, 105, 013707 (2009). DOI: 10.1063/1.2996281.
- [54] T.R. Lenka, G.N. Dash, and A.K. Panda. «A Comparative 2DEG Study of $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}/(\text{In}, \text{Al}, \text{Ga}) \text{N}/\text{GaN}$ -based HEMTs» *Physics Procedia*, 25, 36-43 (2012). DOI: 10.1016/j.phpro.2012.03.046.
- [55] M. Akiyama, T. Kamohara, K. Kano, A. Teshigahara, Y. Takeuchi, N. Kawahara «Enhancement of piezoelectric response in scandium aluminum nitride alloy thin films prepared by dual reactive cosputtering» *Advanced Materials*, 21(5), 593 (2009). DOI: 10.1002/adma.200802611.

- [56] F. Tasnadi, B. Alling, C. Hoglund, G. Wingqvist, J. Birch, L. Hultman, and I.A. Abrikosov «Origin of the anomalous piezoelectric response in wurtzite ScAlN alloys» *Physical review letters*, 104, 137601 (2010). DOI: 10.1103/PhysRevLett.104.137601.
- [57] M.T. Hardy, B.P. Downey, N. Nepal, D.F. Storm, D.S. Katzer, and D.J. Meyer «Epitaxial ScAlN grown by molecular beam epitaxy on GaN and SiC substrates» *Applied Physics Letters*, 110, 162104 (2017). DOI: 10.1063/1.4981807.
- [58] K. Frei, R. Trejo-Hernandez, S. Schutt, L. Kirste, M. Prescher, R. Aidam, S. Muller, P. Waltereit, O. Ambacher, and M. Fiederle «Investigation of growth parameters for ScAlN-barrier HEMT structures by plasma-assisted MBE» *Japanese Journal Applied Physics*, 58, SC1045 (2019). DOI: 10.7567/1347-4065/ab124f.
- [59] J. Ligl, S. Leone, C. Manz, L. Kirste, P. Doering, T. Fuchs, M. Prescher, and O. Ambacher «Metalorganic chemical vapor phase deposition of AlScN/GaN heterostructures» *Journal of Applied Physics*, 127, 195704 (2020). DOI: 10.1063/5.0003095.
- [60] P. Doring, S. Krause, P. Waltereit, P. Bruckner, S. Leone, I. Streicher, M. Mikulla, R. Quay «Voltage-margin limiting mechanisms of AlScN-based HEMTs» *Applied Physics Letters*, 123(3) (2023). DOI: 10.1063/5.0159501.
- [61] S. Krause, I. Streicher, P. Waltereit, L. Kirste, P. Bruckner, and S. Leone «AlScN/GaN HEMTs grown by metal-organic chemical vapor deposition with 8.4 W/mm output power and 48% power-added efficiency at 30 GHz» *IEEE Electron Device Letters*, 44.1, 17-20 (2022). DOI: 10.1109/LED.2022.3220877.
- [62] L.H. Hsu, Y.Yu Lai, P.T. Tu, C. Langpoklakpam, Y.T. Chang, Y.W. Huang, W.C. Lee, A.J. Tzou, Y.J. Cheng, C.H. Lin, H.-C. Kuo, E.Y. Chang «Development of GaN HEMTs Fabricated on Silicon, Silicon-on-Insulator, and Engineered Substrates and the Heterogeneous Integration», *Micromachines* 12(10), 1159, 1-32 (2021). DOI: 10.3390/mi12101159.
- [63] S. Veizan, A.L. Louarn, J. Massies «Selective epitaxial growth of AlN and GaN nanostructures on Si(111) by using NH₃ as nitrogen source» *Journal of Crystal Growth* 303, 419–426 (2007). DOI:10.1016/j.jcrysgr.2007.01.007.

- [64] F.A. Marino, N. Faralli, T. Palacios, D.K. Ferry, St.M. Goodnick, M. Saraniti «Effects of Threading Dislocations on AlGaN/GaN High-Electron Mobility Transistors» *IEEE Transactions on Electron Devices*, 57(1), 353 - 360 (2010). DOI: 10.1109/TED.2009.2035024.
- [65] S.W. Kaun, P.G. Burke, M.H. Wong, E.C.H. Kyle, U.K. Mishra, J.S. Speck «Effect of dislocations on electron mobility in AlGaN/GaN and AlGaN/AlN/GaN heterostructures» *Applied Physics Letters*, 101, 262102 (2012). DOI: 10.1063/1.4773510.
- [66] N.H. Zhang, X.L. Wang, Y.P. Zeng, H.L. Xiao, J.X. Wang, H.X. Liu, J.M. Li «Growth and properties of GaN on Si (111) substrates with AlGaN/AlN buffer layer by NH₃-GSMBE» *J. Phys. D: Appl. Phys.*, Vol. 38, Iss. 12, pp. 1888–1891 (2005). DOI: 10.1088/0022-3727/38/12/006.
- [67] A. Gkanatsiou, Ch.B. Lioutas, N. Frangis, E.K. Polychroniadis, P. Prystawko, M. Leszczynski «Electron microscopy characterization of AlGaN/GaN heterostructures grown on Si(111) substrates» *Superlattices and Microstructures* 103 (2016). DOI: 10.1016/j.spmi.2016.10.024.
- [68] S.A. Nikishin, N.N. Faleev, V.G. Antipov, S. Francoeur, L. Grave de Peralta, G. Seryogin, H. Temkin, T.I. Prokofyeva, M. Holtz, S.N.G. Chu «High quality GaN grown on Si(111) by gas source molecular beam epitaxy with ammonia» *APL*, 75(14), 2073–2075 (1999). DOI: 10.1063/1.124920.
- [69] H.P.D. Schenk, E. Frayssinet, A. Bavard, D. Rondi, Y. Cordier, M. Kennard «Growth of thick, continuous GaN layers on 4-in. Si substrates by metalorganic chemical vapor deposition» *J. Cryst. Growth*, 314(1), 85–91 (2011). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2010.10.170.
- [70] Qiankun Yang, Zhonghui Li, Lei Pan, Weike Luo, Xun Dong «Role of different kinds of superlattices on the strain engineering of GaN films grown on Si(111)» *Superlattices and Microstructures* 109, 249-253 (2017). DOI: 10.1016/j.spmi.2017.05.008.
- [71] F. Semond, Y. Cordier, N. Grandjean, F. Natali, B. Damilano, S. Vezian and J. Massies «Molecular Beam Epitaxy of Group-III Nitrides on Silicon Substrates:

- Growth, Properties and Device Applications» *Phys. stat. sol. (a)* 188, No. 2, 501–510 (2001). DOI: 10.1002/1521-396X(200112)188:23.0.CO;2-6.
- [72] Q. Yan, A. Janotti, M. Scheffler, C.G. Van de Walle «Role of nitrogen vacancies in the luminescence of GaN» *Applied Physics Letters* 100, 142110 (2012). DOI: 10.1063/1.3699009.
- [73] M.A. Reshchikov «Photoluminescence from Vacancy-Containing Defects in GaN» *Physica Status Solidi A*, 220, 2200402 (2023). DOI:10.1002/pssa.202200402.
- [74] C.G. Van de Walle, J. Neugebauer «First-principles calculations for defects and impurities: Applications to III-nitrides» *Journal of Applied Physics*, 95(8), 3851–3879 (2004). DOI:10.1063/1.1682673.
- [75] Z. Bougrioua, M. Azize, A. Jimenez, A.-F. Brana, P. Lorenzini, B. Beaumont, E. Munoz, and P. Gibart, «Fe doping for making resistive GaN layers with low dislocation density; consequence on HEMTs» *Physica Status Solidi C*, 2, 2424 (2005). DOI: 10.1002/pssc.200461588.
- [76]. W.V. Lundin, A.V. Sakharov, E.E. Zavarin, D.Yu. Kazantsev, B.Ya. Ber, M.A. Yagovkina, P.N. Brunkov, and A.F. Tsatsulnikov, «Study of GaN doping with carbon from propane in a wide range of MOVPE conditions» *Journal of Crystal Growth*, 449, 108 (2016). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2016.06.002.
- [77] M. Rudzinski, V. Desmaris, P.A. van Hal, J.L. Weyher, P.R. Hageman, K. Dynefors, T.C. Rodle, H.F.F. Jos, H. Zirath, and P.K. Larsen, «Growth of Fe doped semi-insulating GaN on sapphire and 4H-SiC by MOCVD» *Physica Status Solidi C*, 3, 2231 (2006). DOI: 10.1002/pssc.200565379.
- [78] N.G. Weimann, L.F. Eastman, D. Doppalapudi, H.M. Ng, and T.D. Moustakas, «Scattering of electrons at threading dislocations in GaN» *Journal of Applied Physics*, 83, 3656 (1998). DOI: 10.1063/1.366585.
- [79] C. Adelman, J. Brault, G. Mula, B. Daudin «Gallium adsorption on (0001) GaN surfaces» *Physical Review B* 67, 165419 (2003). DOI: 10.1103/PhysRevB.67.165419.

- [80] Z.H. Li, P.F. Shao, G.J. Shi, Y.Z. Wu, Z.P. Wang, S.Q. Li, D.Q. Zhang, T. Tao, Q.J. Xu, Z.L. Xie, J.D. Ye, D.J. Chen, B. Liu, K. Wang, Y.D. Zheng, R. Zhang «Plasma assisted molecular beam epitaxial growth of GaN with low growth rates and their properties» *Chinese Physics B* 31(1), 018102 (2022). DOI: 10.1088/1674-1056/ac339d.
- [81] N. Chaaben, J. Laifi, H. Bouazizi, C. Saidi, A. Bchetnia, B. El Jani «Study of Al diffusion in GaN during metal organic vapor phase epitaxy of AlGaN/GaN and AlN/GaN structures» *Materials Science in Semiconductor Processing* 42, 359–363 (2016). DOI: 10.1016/j.mssp.2015.11.008.
- [82] M. Nemoz, F. Semond, S. Rennesson, M. Leroux, S. Bouchoule, G. Patriarche, J. Zuniga-Perez «Interdiffusion of Al and Ga in AlN/AlGaN superlattices grown by ammonia-assisted molecular beam epitaxy» *Superlattices and Microstructures* 150, 106801, (2021). DOI: 10.1016/j.spmi.2020.106801.
- [83] W.K. Burton, N. Cabrera, F.C. Frank «The Growth of Crystals and the Equilibrium Structure of their Surfaces» *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 243(866), 299–358 (1951). DOI: 10.1098/rsta.1951.0006.
- [84] J. H. E. Cartwright, A. G. Checa, B. Escribano, C. Ignacio Sainz-Diaz «Crystal growth as an excitable medium» *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 370(1969), 2866–2876 (2012). DOI: 10.1098/rsta.2011.0600.
- [85] K. Zhou, J. Liu, S. Zhang, Z. Li, M. Feng, D. Li, H. Yang «Hillock formation and suppression on c-plane homoepitaxial GaN layers grown by metalorganic vapor phase epitaxy» *Journal of Crystal Growth*, 371, 7–10 (2013). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2013.01.029.
- [86] A. Le Louarn, S. Vezian, F. Semond, J. Massies «AlN buffer layer growth for GaN epitaxy on (111) Si: Al or N first?» *Journal of Crystal Growth*, 311, 3278–3284 (2009). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2009.04.001.
- [87] Vladimir G. Mansurov, Timur V. Malin, Yuriy G. Galitsyn, Alexander A. Shklyaev, Konstantin S. Zhuravlev «Kinetics and thermodynamics of Si(111)

surface nitridation in ammonia» *Journal of Crystal Growth*, 441, 12-17, (2016).
10.1016/j.jcrysgro.2016.02.007.

[88] Mansurov V.G., Galitsyn Yu.G., Malin T.V., Teys S.A., Milakhin D.S., Zhuravlev K.S «Evolution of the atomic and electronic structures during nitridation of the Si(111) surface under ammonia flux» *Applied Surface Science*, 571, 151276 (2022). DOI: 10.1016/j.apsusc.2021.151276.

[89] В.Г. Мансуров, Т.В. Малин, Д.Д. Башкатов, Д.С. Милахин, К.С. Журавлев «Химическая кинетика процесса нитридации поверхности Si(111) при температурах ниже структурного фазового перехода $(7\times 7)\rightarrow(1\times 1)$ » *Физика и Техника Полупроводников*, 58 (7), 349-357 (2024). DOI: 10.61011/FTP.2024.07.59177.6328H.

[90] Vladimir Mansurov, Timur Malin, Sergey Teys, Victor Atuchin, Denis Milakhin and Konstantin Zhuravlev «STM/STS Study of the Density of States and Contrast Behavior at the Boundary between $(7\times 7)N$ and (8×8) Structures in the SiN/Si(111) System» *Crytstals*, 12, 1707 (2022). DOI: 10.3390/cryst12121707.

[91] D.D. Bashkatov, T.V. Malin, V.G. Mansurov, D.S. Milakhin, K.S. Zhuravlev «Chemical Kinetics of the Nitridation Process of Silicon Si(111) Substrates at Different Ammonia Fluxes» *IEEE 24th INTERNATIONAL CONFERENCE OF YOUNG PROFESSIONALS IN ELECTRON DEVICES AND MATERIALS (EDM 2023)*. DOI: 10.1109/EDM58354.2023.10225173.

[92] Sebastian Tamariz, Denis Martin, Nicolas Grandjean «AlN grown on Si(111) by ammonia-molecular beam epitaxy in the 900–1200 °C temperature range» *Journal of Crystal Growth*, 476, 58–63 (2017). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2017.08.006.

[93] F. Semond «Epitaxial challenges of GaN on silicon» *MRS Bulletin*, 40(05), 412–417 (2015). DOI: 10.1557/mrs.2015.96.

[94] A.L. Corrion, C. Poblenz, F. Wu, J.S. Speck «Structural and morphological properties of GaN buffer layers grown by ammonia molecular beam epitaxy on SiC substrates for AlGaN/GaN high electron mobility transistors» *JAP*, 103(9), 093529 (2008). 10.1063/1.2919163.

- [95] C. Poblenz, A.L. Corrión, F. Recht, C.S. Suh, R. Chu, L. Shen, J.S. Speck, U.K. Mishra «Power Performance of AlGaIn/GaN HEMTs Grown on SiC by Ammonia-MBE at 4 and 10 GHz» *IEEE Electr. Device L.*, 28(11), 945–947 (2007). DOI: 10.1109/led.2007.907266.
- [96] S. Vézian, F. Natali, F. Semond, J. Massies «From spiral growth to kinetic roughening in molecular-beam epitaxy of GaN(0001)» *PRB*, 69(12), 125329 (2004). DOI: 10.1103/physrevb.69.125329.
- [97] Yvon Cordier, Marc Portail, Sébastien Chenot, Olivier Tottereau, Marcin Zielinski, «AlGaIn/GaN high electron mobility transistors grown on 3C-SiC/Si(111)» *Journal of Crystal Growth*, 310, 4417–4423 (2008). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2008.07.063.
- [98] V.Yu. Davydov, N.S. Averkiev, I.N. Goncharuk, D.K. Nelson, I.P. Nikitina, A.S. Polkovnikov, A.N. Smirnov, M.A. Jacobson, and O.K. Semchinova «Raman and photoluminescence studies of biaxial strain in GaN epitaxial layers grown on 6H-SiC» *Journal of Applied Physics*, 82, 5097 (1997). DOI: 10.1063/1.366310.
- [99] Ilya Milekhin, Kirill Anikin, Nina N. Kurus, Vladimir G. Mansurov, Timur V. Malin, Konstantin S. Zhuravlev, Alexander G. Milekhin, Alexander V. Latyshev, Dietrich R.T. Zahn «Local phonon imaging of AlN nanostructures with nanoscale spatial resolution» *Nanoscale Advances* 5, 2820 (2023). DOI: 10.1039/d3na00054k.
- [100] A.R. Goni, H. Siegle, K. Syassen, C. Thomsen, J.M. Wagner «Effect of pressure on optical phonon modes and transverse effective charges in GaN and AlN» *Physical Review B*, 64(3), 035205 (2001). DOI: 10.1103/PhysRevB.64.035205.
- [101] J. Gleize, M.A. Renucci, J. Frandon, E. Bellet-Amalric, B. Daudin «Phonon deformation potentials of wurtzite AlN» *Journal Applied Physics* 93(4), 2065–2068 (2003). DOI: 10.1063/1.1539531.
- [102] V. Mansurov, T. Malin, Yu. Galitsyn, and K. Zhuravlev «Graphene-like AlN Layer Formation on (111)Si Surface by Ammonia MBE» *Journal Crystal Growth*, 428, 93 (2015). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2015.07.030.

- [103] R. Liu, F.A. Ponce, A. Dadgar, A. Krost «Atomic arrangement at the AlN/Si(111) interface» *Applied Physics Letters*, 83(5), 860–862, (2003). DOI: 10.1063/1.1597749.
- [104] M.N. Fireman, H. Li, S. Keller, U.K. Mishra, J.S. Speck «Growth of N-polar GaN by ammonia molecular beam epitaxy» *Journal of Crystal Growth* 481, 65-70 (2018). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2017.10.033.
- [105] T. Tanikawa S. Kuboya, T. Matsuoka «Control of impurity concentration in N-polar (0001) GaN grown by metalorganic vapor phase epitaxy» *Physica Status Solidi B* 254(8), 1600751 (2017). DOI: 10.1002/pssb.201600751.
- [106] C.L. Reynolds Jr., J.G. Reynolds, A. Crespo, J.K. Gillespie, K.D. Chabak, R.F. Davis «Dislocations as quantum wires: Buffer leakage in AlGaIn/GaN Heterostructures» *Journal of Materials Research* 28(13), 1687-1691 (2013). DOI: 10.1557/jmr.2013.76.
- [107] Yu Cao, Tom Zimmermann, Huili Xing, and Debdeep Jena «Polarization-engineered removal of buffer leakage for GaN transistors» *Applied Physics Letters* 96, 042102 (2010). DOI: 10.1063/1.3293454.
- [108] Ming Tao, Maojun Wang, Shaofei Liu, Bing Xie, Min Yu, Cheng P. Wen, Jinyan Wang, Yilong Hao, Wengang Wu, Bo Shen «Buffer-Induced Time-Dependent OFF-State Leakage in AlGaIn/GaN High Electron Mobility Transistors on Silicon» *IEEE Transactions on Electron Devices* 63(12), 4860-4864 (2016). DOI: 10.1109/TED.2016.2614332.
- [109] Т.В. Малин, Д.С. Милахин, И.А. Александров, В.Е. Земляков, В.И. Егоркин, А.А. Зайцев, Д.Ю. Протасов, А.С. Кожухов, Б.Я. Бер, Д.Ю. Казанцев, В.Г. Мансуров, К.С. Журавлёв «Нелегированный высокоомный буфер GaN для AlGaIn/GaN НЕМТ» *Письма в ЖТФ*, 45(15), 21-24 (2019). DOI: 10.21883/PJTF.2019.15.48081.17844.
- [110] L. Ravikiran, K. Radhakrishnan, S. Munawa Basha, N. Dharmarasu, M. Agrawal, C.M. Manoj kumar, S. Arulkumaran, and G.I. Ng «Study on GaN buffer leakage current in AlGaIn/GaN high electron mobility transistor structures

- grown by ammonia-molecular beam epitaxy on 100-mm Si(111)» *Journal of Applied Physics* 117, 245305 (2015). DOI: 10.1063/1.4923035.
- [111] G. Atmaca , S. Ardali, E. Tiras, T. Malin, V.G. Mansurov, K.S. Zhuravlev, S.B. Lisesivdin «Scattering analysis of 2DEG mobility in undoped and doped AlGa_N/AlN/GaN heterostructures with an in situ SiN passivation layer» *Solid-State Electronics*, 118, 12–17 (2016). DOI: 10.1016/j.sse.2016.01.006.
- [112] A.M. Dabiran, A.M. Wowchak, A. Osinsky, J. Xie, B. Hertog, B. Cui, D.C. Look, P.P. Chow «Very high channel conductivity in low-defect AlN/GaN high electron mobility transistor structures» *Applied Physics Letters* 93, 082111 (2008). DOI: 10.1063/1.2970991.
- [113] F. Medjdoub, M. Zegaoui, D. Ducatteau, N. Rolland, P. A. Rolland «High-Performance Low-Leakage-Current AlN/GaN HEMTs Grown on Silicon Substrate» *IEEE Electron Device Letters*, 32(7), 874-876, (2011). DOI: 10.1109/LED.2011.2138674.
- [114] A.R. Smith, R.M. Feenstra, D.W. Greve, M.-S. Shin, M. Skowronski, J. Neugebauer, J.E. Northrup «GaN(0001) surface structures studied using scanning tunneling microscopy and first-principles total energy calculations» *Surface Science*, 423(1), 70–84 (1999). DOI: 10.1016/s0039-6028(98)00903-0.
- [115] C.G. Dunn, E.F. Kogh «Comparison of dislocation densities of primary and secondary recrystallization grains of Si-Fe.» *Acta Metallurgica*, 5(10), 548–554, (1957). DOI: 10.1016/0001-6160(57)90122-0.
- [116] M.A. Reshchikov «Measurement and analysis of photoluminescence in GaN» *Journal of Applied Physics*, 129(12), 121101 (2021). DOI: 10.1063/5.0041608.
- [117] B. Monemar «Fundamental energy gap of GaN from photoluminescence excitation spectra» *Physical Review B*, 10(2), 676–681 (1974). DOI: 10.1103/physrevb.10.676.
- [118] S. Chichibua, A. Shikanai, T. Azuhata, T. Sota, A. Kuramata, K. Horino, S. Nakamura, «Effects of biaxial strain on exciton resonance energies of hexagonal GaN heteroepitaxial layers» *Applied Physics Letters*, 68(26), 3766–3768 (1996). DOI: 10.1063/1.116000.

[119] M.A. Reshchikov, H. Morkoc «Luminescence properties of defects in GaN» Journal of Applied Physics, 97(6), 061301 (2005). DOI: 10.1063/1.1868059.

Публикации по теме диссертации

Статьи в рецензируемых журналах:

В публикациях в рецензируемых научных изданиях (перечень ВАК РФ):

A1. **Т.В. Малин**, Д.С. Милахин, В.Г. Мансуров, Ю.Г. Галицын, А.С. Кожухов, В.В. Ратников, А.Н. Смирнов, В.Ю. Давыдов, К.С. Журавлёв «Влияние степени нитридации сапфира и обогащения алюминием зародышевого слоя на структурные свойства слоев AlN» Физика и Техника Полупроводников, том 52, вып. 6, (2018). DOI: 10.21883/FTP.2018.06.45930.8600.

A2. **Т.В. Малин**, Д.С. Милахин, В.Г. Мансуров, А.С. Кожухов, Д.Ю. Протасов, И.Д. Лошкарёв, К.С. Журавлёв «Рост Al(Ga)N/GaN гетероэпитаксиальных транзисторных структур: от GaN буфера до SiN пассивации поверхности», Автометрия, том 56, вып. 5, 44-51, (2020). DOI: 10.15372/AUT20200500.

В публикациях научных изданий, индексируемых базами Scopus/Web of Science приравниваемых к публикациям, в которых излагаются основные научные результаты диссертации:

A3. **Timur Malin**, Igor Osinnykh, Vladimir Mansurov, Dmitriy Protasov, Sergey Ponomarev, Denis Milakhin, Konstantin Zhuravlev «Effect of growth temperature of NH₃-MBE grown GaN-on-Si layers on donor concentration and leakage currents» Journal of Crystal Growth 626, 127459 (2024). DOI: 10.1016/j.jcrysgr.2023.127459.

A4. **Timur Malin**, Yan Maidebura, Vladimir Mansurov, Tatyana Gavrilova, Anton Gutakovsky, Vladimir Vdovin, Sergey Ponomarev, Ivan Loshkarev, Igor Osinnykh, Vladimir Volodin, Denis Milakhin, Konstantin Zhuravlev «Influence of substrate nitridation conditions and buffer layer structures on the growth of

crack-free GaN layers on silicon substrate grown by ammonia assisted MBE» *Thin Solid Films*, 791, 140246 (2024). DOI: 10.1016/j.tsf.2024.140246.

A5. Denis Milakhin, **Timur Malin**, Vladimir Mansurov, Yan Maidebura, Dmitriy Bashkatov, Ilya Milekhin, Sergey Goryainov, Vladimir Volodin, Ivan Loshkarev, Vladimir Vdovin, Anton Gutakovskii, Sergei Ponomarev, Konstantin Zhuravlev «Tackling residual tensile stress in AlN-on-Si nucleation layers via the controlled Si(111) surface nitridation» *Surfaces and Interfaces*, 51, 104817 (2024). DOI: 10.1016/j.surfin.2024.104817.

A6. **Timur Malin**, Denis Milakhin, Vladimir Mansurov, Vladimir Vdovin, Anton Kozhukhov, Ivan Loshkarev, Ivan Aleksandrov, Dmitry Protasov, Konstantin Zuravlev «Electrophysical parameter comparison of 2DEG in AlGaN/GaN heterostructures grown by the NH₃-MJE technique on sapphire and silicon substrates» *Journal of Crystal Growth*, 588, 126669 (2022). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2022.126669.

Тезисы докладов:

A7. **Т.В. Малин**, Д.С. Милахин, В.Г. Мансуров, Ю.Г. Галицин, А.С. Кожухов, В.В. Ратников, А.Н. Смирнов, В.Ю. Давыдов, К.С. Журавлёв «Влияние нитридизации сапфира и зарождения слоёв AlN на морфологию и структурное совершенство пленок AlN, выращенных методом аммиачной МВЕ» Тезисы докладов 10-й Всероссийской конференции «Нитриды галлия, индия и алюминия – структуры и приборы», 23-25 Марта 2015, Зеленогорск, Санкт-Петербург, Россия, с. 107.

A8. Р.В. Рыжук, **Т.В. Малин**, В.Г. Мансуров, Д.С. Милахин, К.С. Журавлёв, Н.И. Каргин «Температурный диапазон двумерного роста GaN при аммиачной МВЕ» Тезисы докладов 11-й Всероссийской конференции «Нитриды галлия, индия и алюминия – структуры и приборы», 1-3 Февраля 2017, Москва, Россия, с. 40-41.

A9. **T. Malin**, D. Milakhin, V. Mansurov, K. Zhuravlev, A. Kozhukhov, I. Loshkarev «Comparing of the effect on GaN epitaxial layers quality grown by

ammonia molecular beam epitaxy: growth conditions versus AlN buffer layer crystal quality» Abstract book 19th European Workshop on Molecular Beam Epitaxy, 19-22 March 2017, Korobitsyno, St. Peterburg, Russia, p. 102.

A10.Т.В. Малин, Д.С.Милахин, В.Г.Мансуров, В.И.Вдовин, А.С.Кожухов, И.Д. Лошкарёв, И.А. Александров, Д.Ю. Протасов, К.С. Журавлев «Сравнение электрофизических параметров 2DEG в гетероструктурах AlGaIn/GaN, выращенных методом NH₃-МВЕ на сапфировых и кремниевых подложках» Сборник трудов 13-ой Международной научно-практической конференции по физике и технологии наногетероструктурной СВЧ-электроники «МОКЕРОВСКИЕ ЧТЕНИЯ», 25-26 Мая 2022, Москва, Россия, с 14-15.

A11.Т.В. Малин, Д.С.Милахин, В.Г.Мансуров, В.И.Вдовин, А.С.Кожухов, И.Д. Лошкарёв, И.А. Александров, Д.Ю. Протасов, К.С. Журавлев «Гетероструктуры AlGaIn/GaN, выращенные методом аммиачной МЛЭ на отечественных и зарубежных подложках Si(111)» Тезисы докладов 15-ой Российской конференции по физике полупроводников, 3-7 Октября 2022, Нижний Новгород, Россия, с 108.

A12.Т.В. Малин, Я.Е. Майдэбура, В.Г.Мансуров, Т.А. Гаврилова, А.К. Гутаковский, В.И.Вдовин, С.А. Понамарёв, И.Д. Лошкарёв, И.В. Осиных, В.А. Володин, Д.С.Милахин, К.С. Журавлев «Рост свободных от трещин слоёв GaN-on-Si выращиваемых методом NH₃-МВЕ» Сборник трудов 15-ой Международной научно-практической конференции по физике и технологии наногетероструктурной СВЧ-электроники «МОКЕРОВСКИЕ ЧТЕНИЯ», 22-23 Мая 2024, Москва, Россия, с 111-112.