
РОЛЬ ДЕФОРМАЦИОННЫХ ПОЛЕЙ В ФОРМИРОВАНИИ МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ III-НИТРИДОВ

*В.П. Кладько, А.В. Кучук,
Н.В. Сафрюк, Г.В. Станчу, А.Е. Беляев*

Основным направлением данного исследования является изучение дефектной структуры и упруго-деформированного состояния наноструктур, в том числе, с квантовыми точками и массивами квантовых точек. Широко распространенной причиной брака полупроводниковых матриц обычно является возникновение в них на том или ином этапе изготовления или обработки поверхности различных несовершенств кристаллического строения от полей напряжений до дислокаций и локальных дефектов структуры. Подобные структурные нарушения, как известно, очень сильно влияют на картину дифракции рентгеновских лучей, особенно на диффузную его компоненту. Для изучения и оценки физических характеристик дефектной структуры образцов, и следовательно их качества, необходимо было провести некоторые теоретические исследования особенностей формирования дифракционных картин рассеяния в таких объектах.

В процессе выполнения исследований накоплено много результатов, но мы остановимся лишь на некоторых наиболее важных.

Одним из направлений наших исследований была нитридная тематика. Нитрид галлия (GaN) – это широкозонный (~3,4 эВ) полупроводник, который привлекает к себе внимание последние несколько десятков лет. На данный момент интенсивно исследуется GaN в форме нитевидных нанокристаллов (ННК), который является идеальным материалом для проектирования наноразмерных оптоэлектронных устройств, сенсоров, лазеров и т. п. [1]. Как правило, ННК – это почти совершенные кристаллические объекты без каких-либо протяженных дефектов, проникающих в структуру [2–3]. Наоборот, дефекты с плотностью в диапазоне 10^8 – 10^9 см⁻² есть обычным явлением при изготовлении светоизлучающих диодов (СИД) на основе обычной планарной технологии [4, 5]. Даже высокосовершенные подложки GaN обычно имеют плотность дислокаций между 10^5 – 10^6 см⁻², которая оказывает значительное влияние на эффективность и производительность устройств [6]. Уменьшение плотности дефектов может быть очень полезным для оптоэлектронных устройств, таких как светодиоды или лазерные диоды на осно-

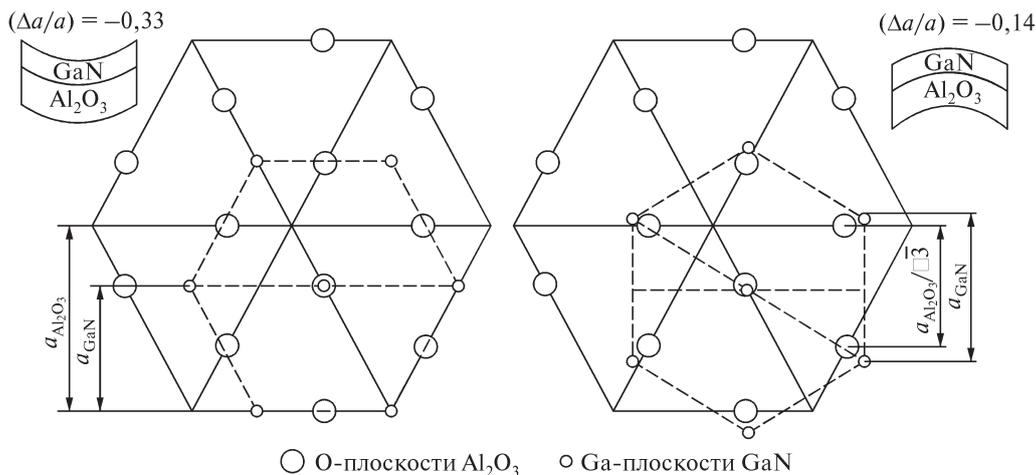


Рис. 1. Картина сопряжения решеток GaN и сапфира в плоскости роста пленки

ве нитридов. Более того, одним из преимуществ ННК, обычно выращиваемых на чужеродных подложках, является на порядок меньшие значения деформаций по сравнению с планарными структурами. В то же самое время процесс релаксации деформаций даже в планарных структурах еще полностью не изучен. Деформации и процессы их релаксации существенно влияют на электрофизические и оптические свойства материала.

С целью изучения физических механизмов релаксации деформаций, методами высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии и теоретического моделирования были исследованы эпитаксиальные AlGa_xN/GaN гетероструктуры, выращенные МOCVD на плоскости (0001) сапфировых Al₂O₃ подложках толщиной 450 и 3000 мкм (далее, тонкая и толстая подложка соответственно) [7–9]. Было установлено, что уровень несоответствия параметров решеток GaN и сапфира зависит от их сопряжения в плоскости роста (рис. 1).

Кроме этого здесь проявился факт влияния толщины сапфировой подложки на деформационное состояние системы Al_xGa_{1-x}N/GaN/Al₂O₃.

Основные результаты такого влияния приведены в таблице.

Лишь благодаря учету всех возможных вкладов в толщинную зависимость радиуса кривизны системы, нам удалось подогнать теоретическую зависимость под эксперимент (рис. 2).

Таким образом, было установлено, что основное различие между деформационными параметрами гетероструктур, выращенных на толстых и тонких подложках, вызвано различными значениями в поворотах шестиугольных ячеек, с относительно эквивалентным влиянием дислокационной структуры. Эти повороты можно отнести к одному из каналов упругой релаксации деформации в системе, потому что они ведут к сокращению кривизны и соответствующих макродеформаций.

Следующим важным результатом было изучение влияния типа темплейта (AlN (S2) или GaN (S1)) и остаточных деформаций буферного слоя GaN на структуру короткопериодных сверхрешеток (КПСР) AlN/GaN [10, 11]. Решеточное несоответствие между квантовой ямой GaN (КЯ) и

Структурные параметры слоев структуры, полученные из анализа рентгеновских данных

Толщина подложки, мкм	Слой	$\epsilon_{\perp} \cdot 10^{-4}$	Плотность дислокаций ($\cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$); краевые/винтовые	Общая плотность дислокаций ($\cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$)	Радиус кривизны, м; эксп./расч.
450	GaN	9,04	13,8/0,98	14,78	9,91/ 0,08
	AlGa _x N	6,9	2,54/2,9	5,44	
3000	GaN	3,04	6,2/1,09	7,29	69,3/ 3,50
	AlGa _x N	3,79	2,8/1,74	4,54	

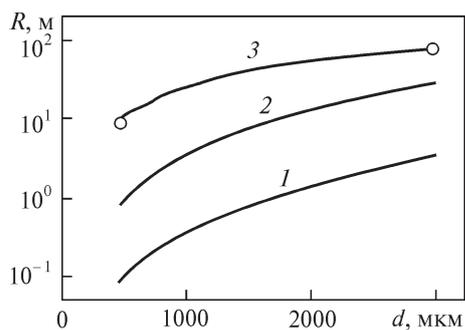


Рис. 2. Радиусы кривизны структур в зависимости от толщины подложки с учетом разворота ячеек и наличия дислокаций в системе: 1 – идеальная система; 2 – учтено наличие дислокаций; 3 – учет дислокаций с разворотом; точки – эксперимент

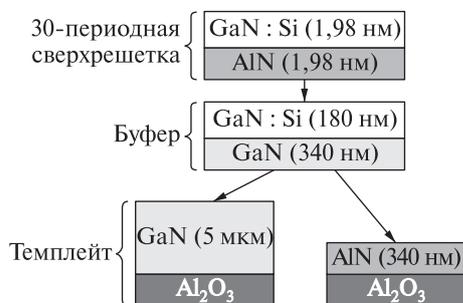


Рис. 3. Схематическое изображение исследуемых СР

AlN барьером (2,5 % в плоскости) в сверхрешетке (СР), а также между СР и подложкой приводит к сложным процессам релаксации деформаций в этих структурах и таким образом, к высокой плотности дефектов (дислокаций, трещин и т. д.) и неконтролируемым деформационным изменениям профиля запрещенной зоны. Именно этими причинами был вызван значительный интерес к исследованиям, посвященным изучению деформационных и релаксационных процессов в GaN/Al(Ga)N СР в последние годы.

Образцы были выращены методом РМБЕ при температуре подложки 760 °С. Номинальные толщины GaN КЯ были $t_{\text{GaN}} = 1,49 \div 2,06$ нм и AlN барьеры были $t_{\text{AlN}} = 1,98 \div 2,05$ нм. Архитектура образцов приведена на рис. 3. При съемке асимметричных карт обратного пространства (КОП) было выявлено, что КПСР на AlN-темплейте растут псевдоморфно к буферному слою, а на GaN-темплейте рост является непсевдоморфным (рис. 4).

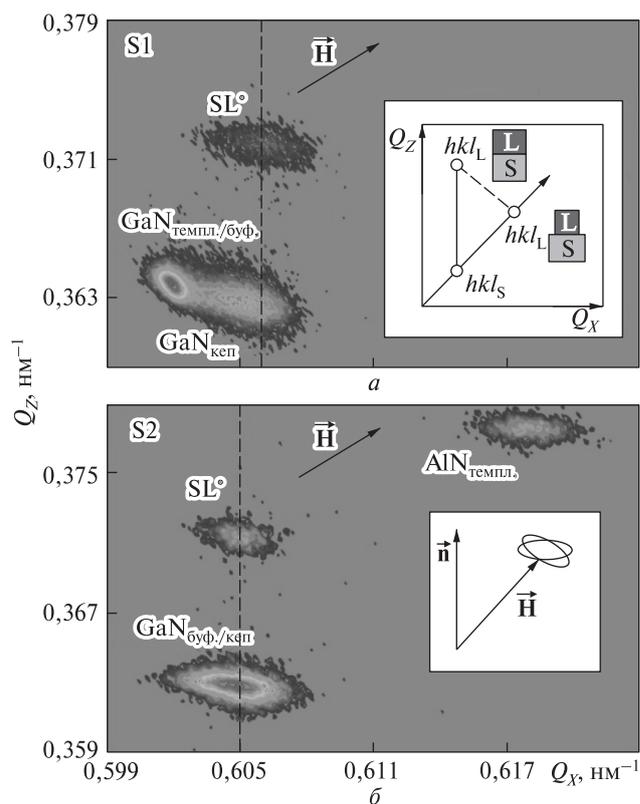


Рис. 4. Асимметричные КОП вокруг узла 12–33 GaN для образцов на GaN-темплейте (а) и AlN-темплейте (б)

Профили деформации по глубине в плоскости были рассчитаны при комнатной температуре для образцов S1 (а) и S2 (б) (рис. 5 и 6).

При этом было выявлено, что толщины слоев КПСР отличаются от технологически заданных и этот эффект является более существенным при росте на AlN-темплейте. Показано, что остаточные деформации в буфере влияют на дальнейший рост КПСР и системы релаксируют по-разному (из-за излишек дислокаций или трещин) в зависимости от типа темплейта. Материал между трещинами является менее дислокационным, поэтому для создания приборов малой площади лучшими кандидатами будут структуры, выращенные на GaN-темплейте.

Анализ КОП дал нам следующую модель деформационного состояния КПСР (рис. 7).

Однако, как мы отметили выше, наблюдается в этих структурах такой феномен, как изменение толщины КЯ при росте на разных темплейтах. Это подтверждено данными рентгеновской дифрак-

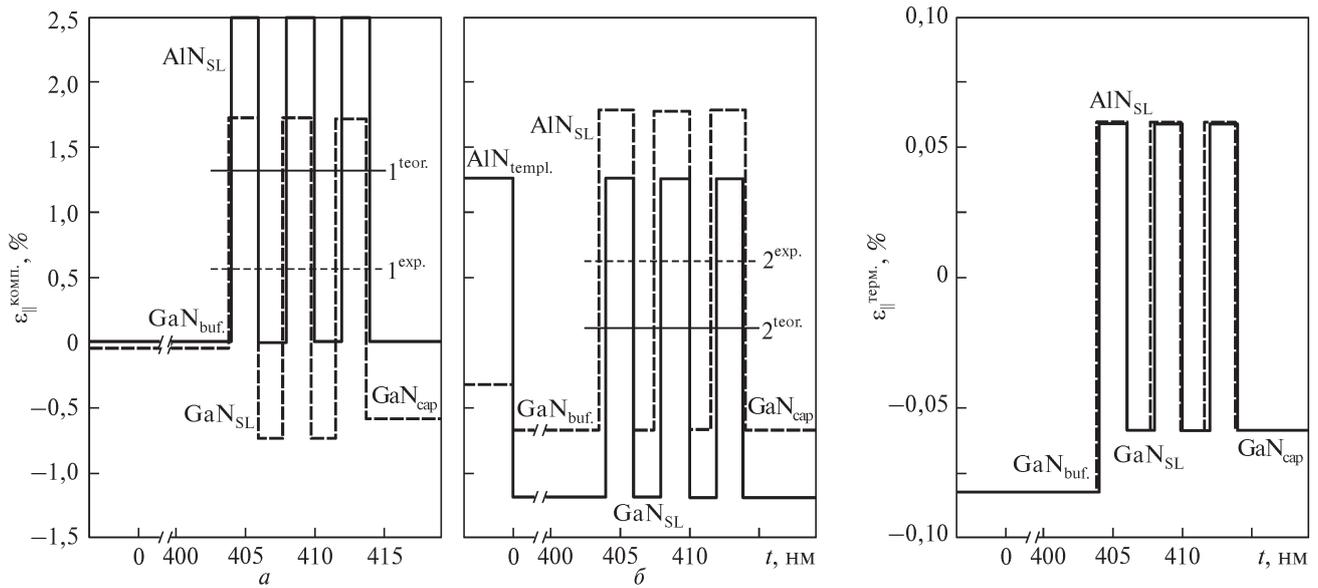


Рис. 5. Профили деформации по глубине в плоскости при комнатной температуре для образцов S1 (а) и S2 (б) на сапфировой подложке: сплошные линии – теоретические; штриховые линии – экспериментальные; горизонтальные линии 1 и 2 показывают теоретические и экспериментальные средние деформации в СП слоях

Рис. 6. В-плоскости тепловые профили деформации по глубине для образца S1, которые появились в результате изменения температуры от T_{GR} до комнатной температуры: сплошная линия – теоретическая; штриховая – экспериментальная

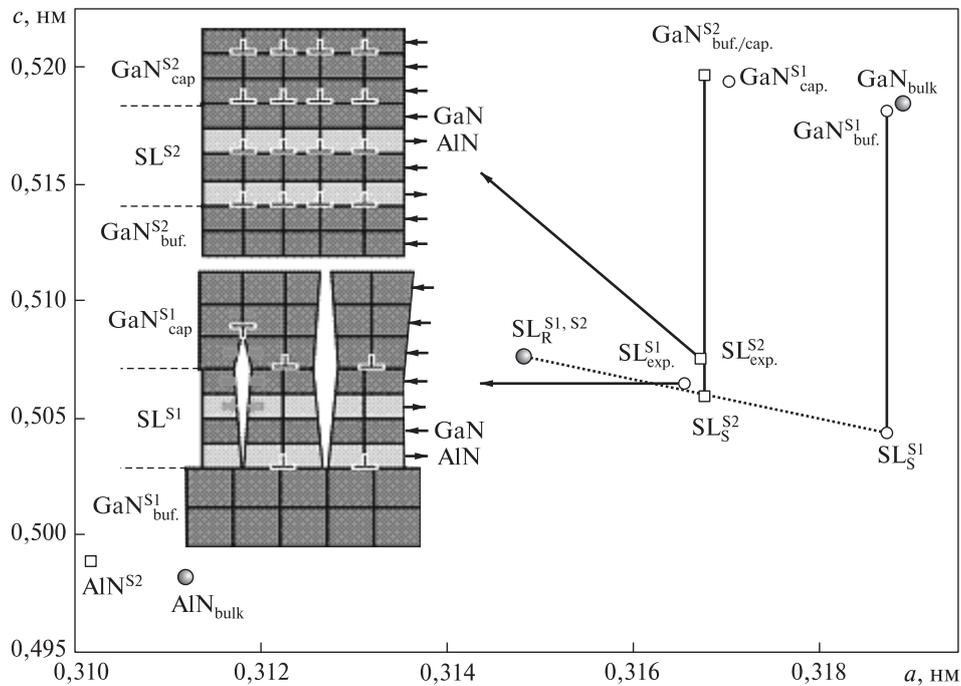


Рис. 7. Экспериментально определенные параметры буферных слоев GaN_{buf} и средние значения параметров КПСП, выращенных на разных темплейтах GaN и AlN

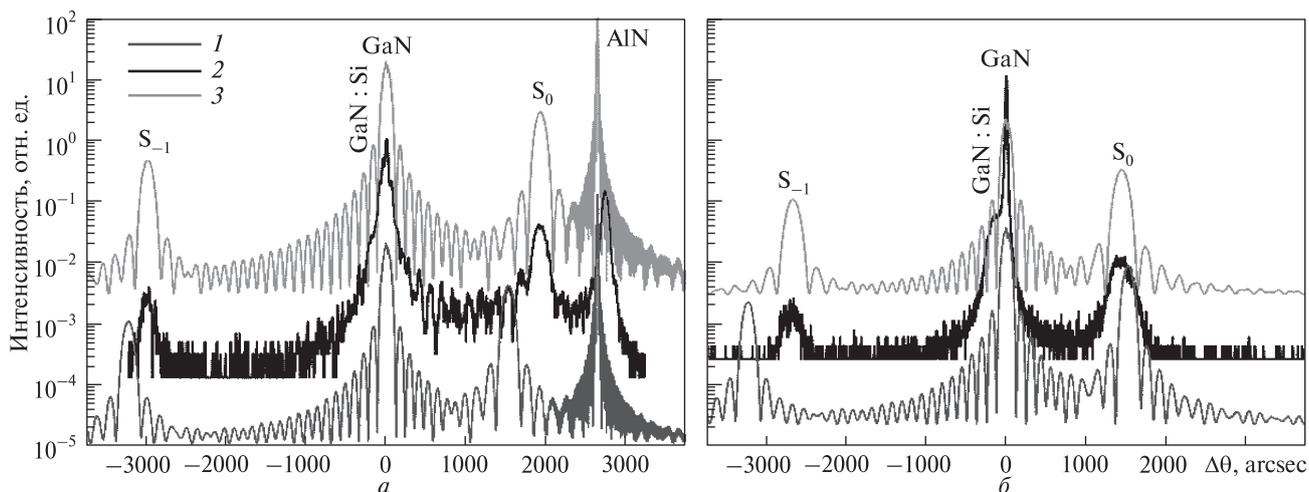


Рис. 8. Высокорастворяющие сканы ω - 2θ для сверхрешеток GaN/AlN при росте на темплейтах AlN (а) и GaN (б): 1 – фитирование; 2 – эксперимент; 3 – симуляция

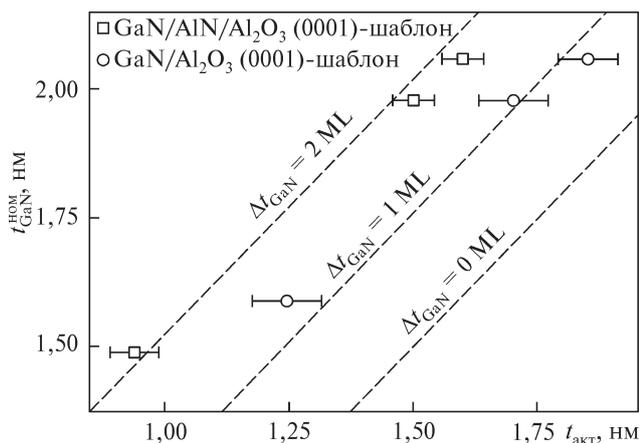
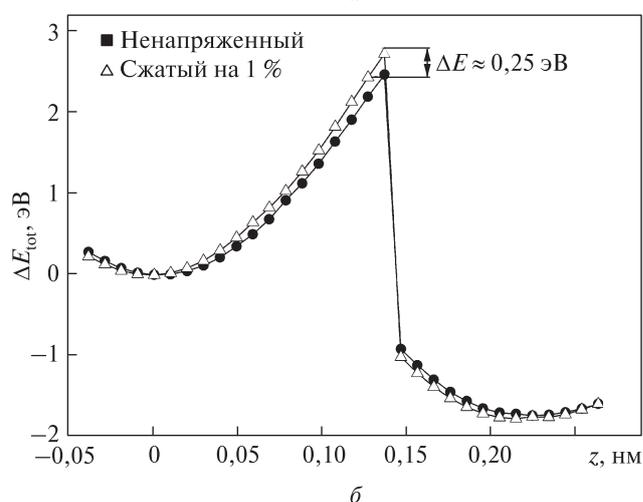
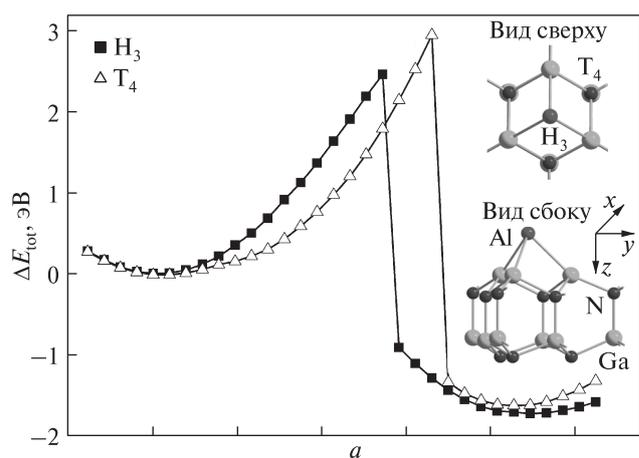


Рис. 9. Зависимости номинальной толщины GaN КЯ ($t_{\text{ном}}$) от фактической толщины GaN КЯ ($t_{\text{акт}}$) для GaN/AlN СР, выращенных на GaN- и AlN-шаблона. Пунктирные линии соответствуют разнице между номинальной и фактической толщинами GaN КЯ ($\Delta t_{\text{GaN}} = 0, 1, 2 \text{ ML}$)

Рис. 10. Расчеты по влиянию деформации на взаимодействие между Al-атомом и GaN (0001), выполненные с использованием функционала плотности: а – в случае ненапряженного GaN (0001) и б – в случае помещения GaN (0001) в положение H3



ции (рис. 8) и расчетами, показанными на рис. 9. Здесь приведены зависимости номинальной толщины GaN КЯ ($t_{\text{ном}}$) от фактической толщины GaN КЯ ($t_{\text{акт}}$) для GaN/AlN СР, выращенных на GaN- и AlN-темплейтах.

В чем причина этого явления? Этот эффект был объяснен в [12] при изучении влияния наращивания AlN на структурные свойства GaN наноструктур. Наблюдаемое утоньшение GaN КЯ объяснялось через GaN разложение из-за механизма обмена между атомами Al от верхнего слоя и атомами Ga из КЯ.

В работе [12] также было показано, что толщина КЯ влияет на снижение количества Ga в КЯ в процессе закупорки (the capping process).

В работе [13] показано, что постепенный процесс релаксации в СР GaN/AlN начинается, когда толщина отдельного слоя является немного более чем 3 нм. Тем не менее, соотношение между толщиной КЯ и ее утоньшением, вызванным ростом покрывающего слоя, впоследствии не обсуждалось. Однако замечено, что процесс утоньшения GaN КЯ коррелирует с процессом релаксации деформации в СР.

Таким образом, экспериментально установлено, что различные количества остаточной деформации от несоответствия решетки подложки вызывают различные значения уменьшения толщины GaN КЯ. Рост на GaN (толстые) и AlN (тонкие) на сапфире вызывает 1 и 2 нм уменьшение соответственно. Расчеты подтверждают наши наблюдения и доказывают, что замена поверхностных атомов Ga на Al адатомы на GaN слоя решетки приводит к существенным понижениям энергии системы (рис. 10). В то же время кинетика такого экзотермического процесса обмена зависит от состояния деформации поверхности GaN через его влияние на высоту энергетического барьера адсорбции. Физически, обмен Al–Ga требует большого смещения поверхностных атомов Ga и напряжение сжатия увеличивает энергию, необходимую для таких крупных смещений. Здесь продемонстрирован микромеханизм обмена между Al адатомами и поверхностными атомами Ga как в начальных так и в конечных этапах замещения. Эта модель объясняет уменьшение толщины GaN КЯ при росте GaN/AlN СР с точки

зрения деформации и температурных эффектов и должна быть рассмотрена при изготовлении высококачественных GaN/AlN короткопериодных СР с контролируемыми периодами.

ЛИТЕРАТУРА

1. Okumura H. Present Status and Future. Prospect of Wide-gap Semiconductor High-Power Devices // J. Appl. Phys. – 2006. – **45**. – P. 7565.
2. Wei Lu, Charles M. Lieber. Semiconductor nanowires // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2006. – **39**. – R387–R406.
3. Knelangen M., Consonni V., Trampert A., Riechert H. In situ analysis of strain relaxation during catalyst-free nucleation and growth of GaN nanowires // Nanotechnology. – 2010. – **21**. – P. 245705.
4. Xu Lin Nguyen, Thi Ngoc Nhien Nguyen, Vinh Thang Chau, Mau Chien Dang. The fabrication of GaN-based light emitting diodes (LEDs) // Adv. Nat. Sci.: Nanosci. Nanotechnol. – 2010. – **1**. – P. 025015.
5. Lester S.D., Ponce F.A., Craford M.G., Steigerwald D.A. High dislocation densities in high efficiency GaN-based light-emitting diodes // Appl. Phys. Lett. – 1995. – **66**. – 1249.
6. Daniel D. Koleske, Mary H. Crawford, Stephen R. Lee et al. Effect of dislocation density on efficiency droop in GaInN/GaN light-emitting diodes // Ibid. – 2007. – **91**. – P. 231114.
7. Kladko V.P., Kuchuk A.V., Safryuk N.V. et al. Mechanism of strain relaxation by twisted nanocolumns revealed in Al-GaN/GaN heterostructures // Ibid. – 2009. – **95**, Iss. 3. – P. 031907-1–031907-3.
8. Кладько В.П., Кучук А.В., Сафрюк Н.В. та ін. Вплив дислокаційної структури на деформаційні процеси в AlGaIn/GaN/(0001)Al₂O₃// Укр. фіз. журн. – 2009. – **54**, № 10. – С. 1014–1020.
9. Вплив дислокацій на деформаційні процеси в гетероструктурах GaAlN/GaN на сапфірі / Сафрюк Н.В., Кучук А.В., Гудименко О.Й., Беляев О.Є., Кладько В.П. // IV Українська наукова конференція з фізики напівпровідників УНКФН-4 : тези доповідей (Запоріжжя, Україна, 15–19 вересня 2009). – 2009. – **2**. – С. 138–139.
10. Kladko V.P., Kuchuk A.V., Safriuk N.V. et al. Influence of template type and buffer strain on structural properties of GaN multilayer quantum wells grown by PAMBE. X-Ray study // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2011. – **44**, № 2. – P. 025403.
11. Kladko Vasyly, Kuchuk Andriyan, Lytvyn Petro et al. Substrate effects on the strain relaxation in GaN/AlN short-period superlattices // Nanoscale Research Lett. – 2012. – **7**. – P. 289.
12. Gogneau N., Jalabert D., Monroy E. et al. Influence of AlN overgrowth on structural properties of GaN quantum wells and quantum dots grown by plasma-assisted molecular beam epitaxy // J. Appl. Phys. – 2004. – **96**. – P. 1104.
13. Bykhovski A.D., Gelmont B.L., Shur M.S. Elastic strain relaxation and piezoeffect in GaN-AlN, GaN-AlGaIn and GaN-InGaIn superlattices // Ibid. – 1997. – **81**. – P. 6332.