

06

## **Влияние энергии ионов азота на рост тонких пленок GaN при молекулярно-пучковой эпитаксии**

© Д.В. Куликов, Ю.В. Трушин, В.С. Харламов

Санкт-Петербургский академический университет —  
научно-образовательный центр нанотехнологий РАН  
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург  
E-mail: trushin@theory.ioffe.ru

*Поступило в Редакцию 24 ноября 2009 г.*

Методом балансных кинетических уравнений исследовалось влияние энергии облучения ионами азота на эпитаксиальный рост тонких пленок GaN. Рассчитана зависимость скорости роста пленок от энергии ионов. Объяснено изменение структуры пленки при разных энергиях облучения. Получено удовлетворительное согласие теоретических оценок с экспериментальными данными.

При молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ), сопровождаемой ионным облучением, в отличие от обычной МПЭ, кроме осаждения атомов с тепловыми энергиями растущий образец одновременно подвергается воздействию ионным пучком с энергией до сотен электронвольт [1–3]. Такое дополнительное облучение позволяет в некоторых случаях (например, при росте нитридных пленок [2–4]) улучшить кристаллические и оптические свойства выращенных образцов. При этом встает вопрос об оптимальном выборе параметров роста, в особенности энергии ионов, поскольку именно облучение ионами позволяет достичь желаемого улучшения свойств пленок. В настоящей работе методами компьютерного моделирования исследуется влияние энергии ионов азота на скорость роста и структуру тонких пленок нитрида галлия, выращенных при помощи МПЭ.

Для описания роста пленок GaN при молекулярно-пучковой эпитаксии, сопровождаемой облучением ионами азота, использовалась физическая модель, предложенная авторами в работе [5], в которой рассматриваются следующие процессы: осаждение азота и галлия, их возможная десорбция, диффузия, образование и рост кластеров

GaN на поверхности, а также уменьшение высоты эти кластеров вследствие баллистического разрушения их „верхушек“ под действием ионного облучения. На основании модели, аналогично работам [4,6–8], записывается система балансных кинетических уравнений для концентраций адатомов азота и галлия, поверхностных концентраций мелких кластеров нитрида галлия, а также для функции распределения больших кластеров GaN по размерам, приведенная в работе [5].

Для учета в физической модели влияния энергии ионов азота в диапазоне до нескольких сотен электронвольт на процессы роста вводятся следующие дополнительные предположения:

1. Диффузионный барьер для адатомов уменьшается из-за возникновения в приповерхностной области пленки электронных возбуждений, вызванных ионным облучением (по механизму потенциальной ионизации, см. [9,10]).

2. Радиационные дефекты, образующиеся на поверхности пленки при энергиях ионов азота  $E_N > 50$  eV, являются дополнительными центрами зарождения поверхностных кластеров GaN.

3. При энергиях ионов азота  $E_N \geq 100$  eV происходит имплантация ионов в пленку, следовательно, облучение создает радиационные дефекты не только на поверхности пленки, но и в ее объеме (см., например, [11]), что снижает эффективность баллистического разрушения „верхушек“ кластеров за счет облучения.

4. Поверхность пленки распыляется ионным пучком.

В настоящей работе система кинетических уравнений, приведенная в [5], с учетом дополнительных предположений 1–4 решалась численно. При этом использовались те же значения параметров, что и в работе [5], за исключением нескольких изменений, которые учитывают приведенные выше предположения (увеличен коэффициент диффузии адатомов, увеличена скорость образования новых поверхностных кластеров GaN, снижена эффективность баллистического разрушения „верхушек“ кластеров за счет облучения при увеличении энергии ионов). Коэффициент распыления пленки GaN, растущей в условиях облучения ионами азота, был определен в зависимости от энергии этих ионов с помощью программы SRIM-2008 [12], которая моделирует единичный каскад в приближении парных столкновений и адекватно рассчитывает процесс распыления данного материала при рассматриваемом в работе диапазоне малых энергий. В расчетах варьировалось неизвестное на сегодняшний день значение поверхностной энергии связи для GaN,

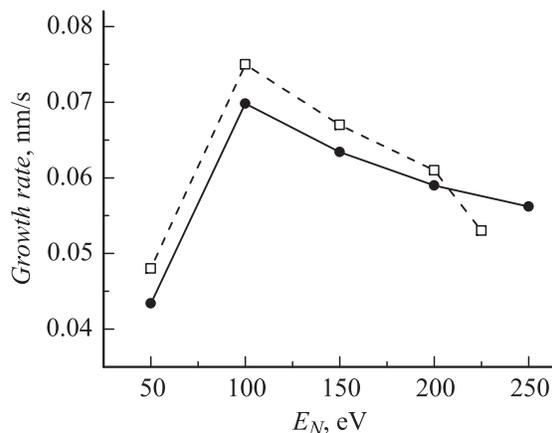
которое было выбрано равным 1.8 eV из наилучшего совпадения результатов моделирования и экспериментальных данных по скорости роста для энергии облучения 100 eV.

В результате получены функции распределения кластеров GaN по размерам для различных энергий ионов азота и вычислены средние расстояния между центрами кластеров. Они оказались равными 400 nm для энергии облучения 50 eV 150 nm для энергий 100 и 150 eV. Такие значения средних расстояний по порядку величины соответствуют результатам атомно-силовой микроскопии [13], в которых размеры кристаллитов растущей пленки нитрида галлия определены: для энергии 50 eV как 500 nm, для энергии 100 eV — 200 nm и для энергии 150 eV — 150 nm.

Кроме того, компьютерное моделирование показало, что при энергиях ионного облучения  $E_N \leq 50$  eV рост нитрида галлия является двумерным, т.е. растущие кластеры высотой 1–2 монослоя полностью покрывают поверхность, и после этого начинает расти следующий слой (аналогичный результат был получен также и в работе [5] для энергии 25 eV). При энергии ионов  $E_N \geq 100$  eV влияние облучения становится менее существенным на поверхности, чем в объеме (см. предположение 3), и механизм разрушения „верхушек“ кластеров ионами оказывается при этом менее эффективным. В результате высота значительного количества кластеров на поверхности достигает уже 3–6 монослоев.

В ходе расчетов была получена зависимость скорости роста пленок GaN от энергии ионов азота, которая приведена вместе с экспериментальными данными [14] на рисунке, удовлетворительно согласующаяся с экспериментом.

Анализ результатов расчетов для скорости роста и структуры пленок GaN выявляет характер влияния ионного облучения на процесс эпитаксии в зависимости от энергии ионов. В соответствии с предположением 1, под воздействием облучения увеличиваются коэффициенты диффузии адатомов, их средний диффузионный пробег, и, следовательно, средний размер кластеров на поверхности. Кроме того, для энергий ионов от 20 до 50 eV облучение разрушает „верхушки“ образующихся на поверхности кластеров GaN, в результате чего подавляется их вертикальный рост. Поэтому в указанном диапазоне энергий ионов азота моделирование показывает двумерный, послойный рост пленки нитрида



Зависимость скорости роста пленки нитрида галлия от энергии ионов азота при потоке ионов  $\Phi = 1.9 \cdot 10^{14} \text{ ions} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$  (сплошная линия — расчет, пунктирная линия — эксперимент [14]).

галлия с лучшим кристаллографическим качеством по сравнению с обычной МПЭ, как и наблюдается в экспериментальных работах [2,3,5].

В соответствии с предположением 2, при возрастании энергии ионов более 50 eV образуются радиационные дефекты на поверхности, которые являются дополнительными центрами зарождения новых поверхностных кластеров. Следовательно, увеличивается плотность кластеров и уменьшаются средний диффузионный пробег адатомов и средний размер кластеров. Кроме того, при энергиях ионов  $E_N \geq 100 \text{ eV}$  происходит фактически их имплантация в пленку, и значительная часть ионной энергии тратится на радиационное повреждение уже объемных слоев (см. предположение 3). Поэтому разрушение „верхушек“ кластеров ионами становится менее эффективным по сравнению со случаем ионных энергий  $E_N \leq 50 \text{ eV}$ . Оба этих фактора (рост плотности кластеров и снижение эффективности разрушения их „верхушек“) приводят, с одной стороны, к увеличению скорости роста пленки (см. рисунок, интервал энергий 50–100 eV), а с другой — к ухудшению ее кристаллографического качества, что подтверждается данными дифракции рентгеновских лучей [13]. При дальнейшем увеличении энергии ионов становится существенным вклад распыления, что вызывает падение

скорости роста пленки (см. рисунок, энергии больше 100 eV), а ее качество при этом еще более ухудшается из-за появления значительного количества радиационных дефектов (см. также [13]).

А при обычной молекулярно-пучковой эпитаксии (без облучения) рост пленки GaN является трехмерным, т. е. кластеры GaN зарождаются на поверхности, затем растут вертикально и в латеральных направлениях со сравнимыми скоростями, после чего срастаются, и в результате образуется поликристаллическая пленка с размером зерна около 20 nm (см. [5]).

Таким образом, на основании сравнения результатов компьютерного моделирования и экспериментальных данных по эпитаксиальному росту пленок GaN, сопровождаемому облучением ионами азота, выявлено влияние облучения на скорость роста пленок, а также на их структуру в зависимости от энергии ионов. Получено, что в интервале энергий ионов от 20 до 50 eV из-за облучения увеличивается подвижность адатомов, а также баллистически разрушаются „верхушки“ растущих на поверхности кластеров, что приводит к послойному двумерному росту пленки с хорошим кристаллографическим качеством. При дальнейшем увеличении энергии ионов появление радиационных дефектов как на поверхности, так и в глубине пленки, а также имплантация ионов и распыление ионным пучком обуславливают снижение качества растущего материала. В работе рассчитана зависимость скорости роста пленки от энергии ионов, удовлетворительно согласующаяся с экспериментальными результатами.

Авторы благодарят проф. Б. Раушенбаха и д-ра Ю. Герлаха (Университет Лейпцига) за предоставленные материалы и ценные обсуждения.

Работа поддержана РФФИ (гранты 07-02-01052, 08-02-01337), а также С.-Петербургским научным центром РАН.

## Список литературы

- [1] *Gaiduk P.I., Hansen J.L., Larsen A.N.* // Appl. Phys. A. 2001. V. 73. P. 761.
- [2] *Sienz S., Gerlach J.W., Höche T., Sidorenko A., Mayerhöfer T., Benndorf G., Rauschenbach B.* // J. Crystal. Growth. 2004. V. 264. P. 184.
- [3] *Gerlach J.W., Hofmann A., Höche T., Frost F., Rauschenbach B., Benndorf G.* // Appl. Phys. Lett. 2006. V. 88. P. 011902.
- [4] *Kharlamov V.S., Kulikov D.V., Trushin Yu.V.* // Vacuum. 1999. V. 52. P. 407.

- [5] *Trushin Yu.V., Kulikov D.V., Safonov K.L., Gerlach J.W., Höche Th., Rauschenbach B.* // J. Appl. Phys. 2008. V. 103. P. 14904.
- [6] *Trushin Yu.V.* Theory of Radiation Processes in Metal Solid Solutions. New York: Nova Science Publishers Inc., 1996. 405 p.
- [7] *Трушин Ю.В.* Радиационные процессы в многокомпонентных материалах (теория и компьютерное моделирование). СПб.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, 2002.
- [8] *Schmidt A.A., Trushin Yu.V., Safonov K.L., Kharlamov V.S., Kulikov D.V., Ambacher O., Pezoldt* // J. Mater. Sci. Forum. 2006. V. 527–529. P. 315.
- [9] *Аброян И.А., Еремеев М.А., Петров Н.Н.* // УФН. 1967. Т. 92. № 1. С. 105.
- [10] *Takeuchi N., Selloni A., Myers T.H., Doolittle A.* // Phys. Rev. B. 2005. V. 72. N 11. P. 115307.
- [11] *Gerlach W., Schwertberger R., Schrupp D., Sienz S., Attenberger W., Rauschenbach B.* // IPAP Conf. Series. 2001. V. 1. P. 202.
- [12] *Ziegler J.F., Biersack J.P., Ziegler M.D.* The Stopping and Range of Ions in Matter. Morrisville. NC: Lulu Press Co, 2008.
- [13] *Gerlach J.W.* Ionenstrahlgestütztes epitaktisches Wachstum hexagonaler Galliumnitrid-Schichten auf c-Saphir. Dissertation. Universität Augsburg. 2000. Mensch & Buch Verlag, Berlin, 2001.
- [14] *Schwertberger R.* Strukturelle Charakterisierung von ionengestützt abge-schiedenen Galliumnitridschichten. Diploma thesis. University of Augsburg. Germany, 1999.