

19,03

Особенности теплопереноса в гетероструктурах $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ на сапфире

© Д.А. Чернодубов, И.О. Майборода, М.Л. Занавескин, А.В. Инюшкин

Национальный исследовательский центр „Курчатовский институт“,
Москва, Россия

E-mail: Chernodubov_DA@nrcki.ru

Поступила в Редакцию 14 ноября 2019 г.

В окончательной редакции 14 ноября 2019 г.

Принята к публикации 28 ноября 2019 г.

Измерена теплопроводность тонких слоев гетероструктур $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ ($0.05 \leq x \leq 1$) на сапфире, полученных методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Получены значения теплопроводности тонких пленок $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ и GaN при комнатной температуре. Концентрационная зависимость теплопроводности проанализирована с использованием модели теплопроводности виртуального кристалла. Проведено численное моделирование теплопереноса в структуре при нагреве в локальной области и предложены оптимальные размеры толщин слоев структуры для достижения высокой величины теплопроводности.

Ключевые слова: теплопроводность, нитрид галлия, нитрид алюминия, сапфир, 3-омега-метод измерения теплопроводности.

DOI: 10.21883/FTT.2020.04.49154.628

1. Введение

В настоящее время широкое применение в электронике находят структуры на основе нитрида галлия. В частности, с использованием гетероструктур $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ изготавливаются полевые транзисторы с высокой подвижностью электронов (ТВПЭ), обладающие высокой выходной мощностью на сверхвысоких частотах [1]. В таких структурах тепловыделение в областях малого размера приводит к сильному локальному перегреву, что существенно ограничивает их характеристики, в частности максимальную мощность, максимальную рабочую частоту, срок их службы [2]. Одним из способов достижения наилучших характеристик ТВПЭ является оптимизация толщин слоев и их состава с целью реализации максимального теплопереноса в структурах. Поэтому исследования теплопроводности слоев представляются актуальными.

Как AlN, так и GaN имеют высокую теплопроводность κ по сравнению с другими полупроводниками, вплоть до $269 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ для GaN [3] и $319 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ для AlN [4] при комнатной температуре в объемных кристаллах высокой чистоты и кристаллического совершенства. Теплопроводность же сплава $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ может быть значительно, более чем на порядок величины, меньше [5]. Это обусловлено сильным рассеянием фононов — основных носителей тепла в рассматриваемых материалах — на дефектах атомного масштаба в разупорядоченном сплаве $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Кроме того, для тонких пленок субмикронной толщины даже при комнатной температуре на величину теплопроводности существенное влияние оказывает рассеяние фононов на границе пленки, в силу чего значение теплопроводности тонкой пленки

оказывается меньше ожидаемой для объемного кристалла. В гетероструктурах $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ граничные тепловые сопротивления между слоями структуры создают значительные ограничения для теплопереноса [6,7]. Но граничное тепловое сопротивление между слоями $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ с градиентным изменением массовой доли x много меньше сопротивления, вызываемого рассеянием на дефектах в сплаве [8]. Это позволяет рассматривать использование подобной структуры буферных слоев в качестве перспективной для оптимизации теплового поведения ТВПЭ.

Существенное влияние на теплоперенос в гетероструктуре $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ оказывает также толщина слоя нитрида галлия [9]. Если толщина мала, то тепловой поток в этом слое распространяется в области с латеральными размерами сравнимыми с областью нагрева. Таким образом, тепловой поток, практически не ухираясь, попадает на тонкий буферный слой со значительным высоким тепловым сопротивлением, что приводит к его перегреву в области потока. С другой стороны, в случае слишком большой толщины слоя GaN тепловое сопротивление структуры определяется его тепловым сопротивлением. Таким образом, существуют оптимальные параметры структуры, которые обеспечивают ее максимальную тепловую эффективность.

Целью настоящей работы является исследование теплопроводности тонких пленок нитрида галлия и нитрида алюминий-галлия в зависимости от состава сплава $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ и моделирование теплопереноса в структуре нитрид галлия на сапфире с целью поиска оптимальной толщины слоя нитрида галлия для минимизации теплового сопротивления гетероструктуры.

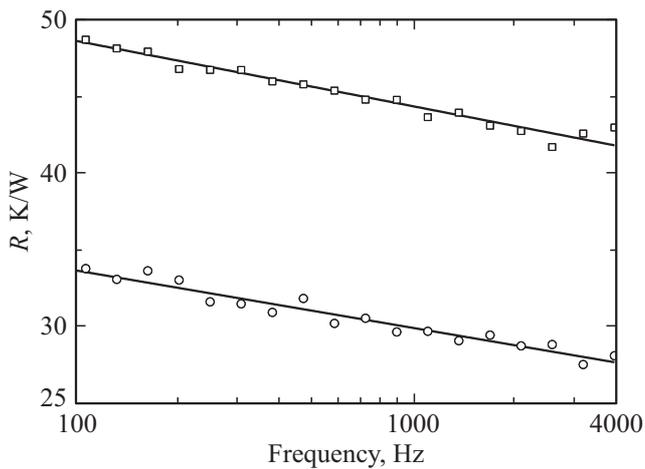


Рис. 1. Зависимость теплового сопротивления R от частоты для пары нагревателей толщиной 10 и $20\ \mu\text{m}$ на структуре $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($0.05 \leq x \leq 1$).

2. Методика измерений

В работе исследованы структуры двух типов, полученные нанесением на монокристаллическую сапфировую подложку толщиной $0.42\ \text{mm}$ методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Структура 1 схематически изображена на вставке на рис. 2 и представляла собой набор буферных слоев $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ общей толщиной $t = 580\ \text{nm}$, состоящий из последовательных слоев низкотемпературного AlN ($10\ \text{nm}$), высокотемпературного AlN ($150\ \text{nm}$), $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ с градиентом по массовой доле x от 1 до 0.6 ($220\ \text{nm}$), $\text{Al}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{N}$ ($140\ \text{nm}$) и $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ с градиентом по x от 0.6 до 0.05 ($60\ \text{nm}$). Структура 2 помимо перечисленного набора слоев включала в себя слой GaN толщиной $1.5\ \mu\text{m}$. Направление кристаллографической оси c сапфировой подложки совпадало с нормалью к ее плоскости и было перпендикулярно слоям гетероструктуры в обоих структурах.

Измерения теплопроводности тонких слоев выполнены методом 3-омега [10]. Для этого на поверхность образцов с использованием фотолитографии были нанесены пары золотых нагревателей в форме полосок с одинаковой толщиной $t = 100\ \text{nm}$, шириной $2b_1 = 10\ \mu\text{m}$ и $2b_2 = 20\ \mu\text{m}$ и длиной около $4\ \text{mm}$ между токовыми выводами (расстояние между потенциальными выводами l было $2\ \text{mm}$). Измерения проводились при комнатной температуре в вакуумированной ячейке. Описание аппаратуры и методики измерений приведено подробнее в работе [11]. Зависимость тепловых сопротивлений R_1 и R_2 нагревателей 1 и 2 от частоты переменного тока, протекающего через них, представлена на рис. 1. Тепловое сопротивление $R_i = \Delta T_i / P_i$, где ΔT_i — амплитуда температурных колебаний нагревателей при подаваемой на них тепловой мощности P_i ($i = 1, 2$). Как видно из рисунка, разность тепловых сопротивлений $R_1 - R_2$ постоянна в широком интервале частот от 100 до 4000 Hz.

Это обстоятельство позволяет использовать методику определения теплопроводности тонкой пленки, предложенную в работе [12]. Согласно ней величина эффективной теплопроводности κ_{eff} слоя $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ составляет

$$\kappa_{\text{eff}} = \frac{t}{2l} \frac{1/b_1 - 1/b_2}{(R_1 - R_2) - (\ln(b_2/b_1)/2\pi l \kappa_s)}, \quad (1)$$

где κ_s — теплопроводность подложки, которая определялась в этом же эксперименте по наклону зависимости R_i от логарифма (натурального) частоты тока через нагреватели. Для использованной нами подложки из монокристаллического сапфира (АО „Монокристалл“, Ставрополь) $\kappa_s = 40.5 \pm 1.6\ \text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$.

3. Результаты и обсуждение

Измеренная величина эффективной теплопроводности κ_{eff} буферного слоя толщиной $t = 580\ \text{nm}$ структуры 1 составила $1.15 \pm 0.05\ \text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ при комнатной температуре. Полученное значение может быть занижено из-за граничных тепловых сопротивлений между слоями структуры. Таким образом, общее тепловое сопротивление слоя составляет $TBR = t/\kappa = 504 \pm 22\ (\text{m}^2 \cdot \text{K})/\text{GW}$, что согласуется с экспериментальными данными по тепловому сопротивлению в структурах GaN на сапфире [7]. Эффективную величину концентрации алюминия для нашей структуры ($x = 0.75$) мы определили как средневзвешенное значение концентраций составляющих ее слоев. Полученные экспериментальные данные представлены на рис. 2, где приведена также теоретическая зависимость теплопроводности сплава $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ в зависимости от концентрации алюминия. Теоретическая зависимость рассчитана в рамках модели виртуального кристалла [5,13]. В этой

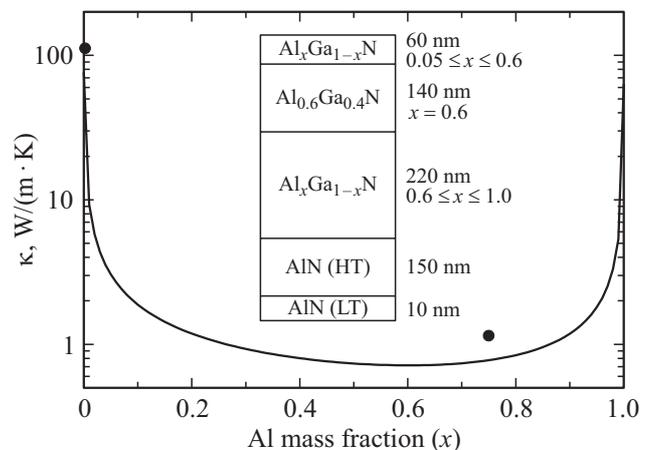


Рис. 2. Зависимость теплопроводности слоя $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ толщиной $580\ \text{nm}$ от массовой доли алюминия в рамках модели виртуального кристалла. Точкой отмечены измеренные значения теплопроводности. Вставка: схематичное изображение исследуемых буферных слоев.

Использованные для вычисления параметры решетки a и c , атомная масса M , атомный объем δ , плотность ρ и упругие постоянные C_{ij} (из работы [16]) и вычисленные с помощью уравнения Кристоффеля дебаевская скорость фононов ν_D и температура Дебая Θ

Параметр	a , Å	c , Å	M , amu	δ , cm ³ /mol	ρ , g/cm ³	C_{11} , GPa	C_{12} , GPa	C_{13} , GPa	C_{33} , GPa	C_{44} , GPa	ν_D , m/s	Θ , K
GaN	3.189	5.178	41.86	14.55	6.15	374.2	141.4	98.1	288.6	98.3	4806	635.8
AlN	3.112	4.928	20.49	13.65	3.266	410.5	148.5	98.9	388.5	124.6	6976	951.5

модели разупорядоченный сплав $Al_xGa_{1-x}N$ представляется как упорядоченный кристалл со средневзвешенными атомными массами и объемами. Величина теплопроводности рассчитывается в приближении Дебая как

$$\kappa = \frac{k_B}{2\pi^2\nu_D} \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 \int_0^{\Theta/T_D} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} \tau dx, \quad (2)$$

где ν_D — дебаевская скорость акустических фононов, Θ — температура Дебая, $x = \hbar\omega/k_B T$, ω — частота фононов, а скорость рассеяния фононов τ^{-1} определяется как сумма скоростей рассеяния фононов на поверхности образца τ_b^{-1} , на точечных дефектах τ_{pd}^{-1} и в ангармонических трехфононных процессах с перебросом τ_U^{-1} . Скорость рассеяния на поверхности образца определяется как $\tau_b^{-1} = \nu_D/t$, где t — толщина кристалла, а скорость рассеяния в процессах переброса как [14] $\tau_U^{-1} = \hbar\gamma^2 T \omega^2 \exp(-\Theta/3T)/M\nu_D^2 \Theta$, где γ — постоянная Грюнайзена (в случае AlN $\gamma = 0.77$ [4]), а M — средняя атомная масса виртуального кристалла.

Скорость рассеяния на точечных дефектах определяется как $\tau_{pd}^{-1} = \delta^3 \Gamma \omega^4 / 4\pi \nu_D^3$, где δ — средний атомный объем сплава, а $\Gamma = \Gamma_{imp} + \Gamma_{alloy}$ — коэффициент рассеяния, слагаемые которого характеризуют рассеяние на примесях и составляющих сплава соответственно. Первое слагаемое Γ_{imp} для $Al_xGa_{1-x}N$ мы принимаем равным средневзвешенному из характерного для этих материалов по экспериментальным данным из работ [4,15]: $\Gamma_{imp} = (1.3x + 3.2(1-x)) \cdot 10^{-4}$. В свою очередь, Γ_{alloy} включает в себя слагаемые, обусловленные существованием в сплаве дефектов массы, локального объема и упругих постоянных. При этом, как показано в работе [13], для изотропного кристалла можно объединить два последних слагаемых и получить следующее выражение: $\Gamma_{alloy} = \sum x_j [((M_j - M)/M)^2 + \varepsilon((\delta_j - \delta)/\delta)^2]$, где x_j , M_j и δ_j — атомная доля, атомная масса и атомный объем одной из компонент сплава, а коэффициент, связывающий дефекты объема и упругих постоянных $\varepsilon = 2((4 + 6.4\nu)(1 + \nu)/(3(1 - \nu)))^2$, где $\nu = C_{12}/(C_{11} + C_{12})$ — коэффициент Пуассона. Дебаевская скорость ν_D и температура Дебая Θ , а также величина коэффициента $\varepsilon = 54$ были строго вычислены нами из скоростей акустических фононов продольной и поперечной поляризации. Скорости фононов в свою очередь были определены из экспериментальных значений упругих модулей с помощью решения уравне-

ния Кристоффеля. Использованные в расчетах величины приведены в таблице.

Как видно из рис. 2, имеется удовлетворительное согласие между экспериментальными данными и теоретическими, что подтверждает возможность рассмотрения набора слоев $Al_xGa_{1-x}N$ как эффективного слоя со средневзвешенным значением x . Из сравнения величин скоростей рассеяния фононов следует, что наибольший вклад в уменьшение величины теплопроводности $Al_xGa_{1-x}N$ оказывает рассеяние на дефектах, характеризующихся величиной Γ_{alloy} , неизбежно возникающих при формировании сплава. Вклад же рассеяния на примесях (Γ_{imp}) на несколько порядков величины меньше, чем вклад рассеяния на составляющих сплава. Следует отметить, что вклад рассеяния на дефекте массы на порядок больше, чем вклад рассеяния на дефектах локального объема и упругих постоянных — это находится в соответствии с тем, что атомные массы Al и Ga отличаются в 2.6 раза, в то время как их упругие постоянные и атомные объемы кристаллов AlN и GaN близки друг к другу. Вклад рассеяния на поверхности образца много меньше такового для рассеяния на дефектах, но много больше вклада процессов переброса, что объясняется малой толщиной исследуемого слоя $Al_xGa_{1-x}N$.

Теплопроводность слоя GaN была определена из разности тепловых сопротивлений $R = \Delta T/P$ нагревателей шириной $20 \mu m$, нанесенных на структуры со слоем нитрида галлия (структура 2) и без него (структура 1). На рис. 3 приведены частотные зависимости тепловых сопротивлений нагревателей, нанесенных на структуры 1 и 2. Из этих данных определено, что теплопроводность слоя GaN составляет $109 \pm 6 W/(m \cdot K)$. Полученная величина более чем в 2 раза меньше теплопроводности объемного кристалла. Для корректного сравнения данных по теплопроводности кристаллов GaN необходимо учитывать влияние размеров образцов на величину теплопроводности. На рис. 4 представлены экспериментальные и теоретические данные по зависимости теплопроводности кристаллических пленок GaN от толщины пленки из работ [17–19]. Как видно, расчетная зависимость (из работы [17]) хорошо согласуется с имеющимися экспериментальными данными, в том числе с экспериментальным результатом, полученным нами для тонкой пленки GaN. Обратим внимание на то, что, поскольку граничное тепловое сопротивление между слоями GaN и $Al_{0.5}Ga_{0.95}N$ мало [8], оно практически не влияет на полученное экспериментальное значение.

Численное моделирование теплопереноса в структуре $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ на сапфире проведено в коммерческой компьютерной программе TCAD-моделирования. В качестве источника тепла использована область размером $10\text{ nm} \times 1\text{ mm}$ на верхней поверхности слоя нитрида галлия. Тепловое сопротивление R определено как отношение разности температур на верхней и нижней поверхностях структуры к прикладываемой тепловой мощности. Зависимость теплового сопротивления структуры нитрида галлия на сапфире с буферными слоями от толщины слоя нитрида галлия представлена на рис. 5. Видно, что при малых толщинах слоя нитрида галлия слабое уширение теплового потока от области нагрева приводит к увеличению теплового сопротивления структуры. После достижения минимума теплового сопротивления

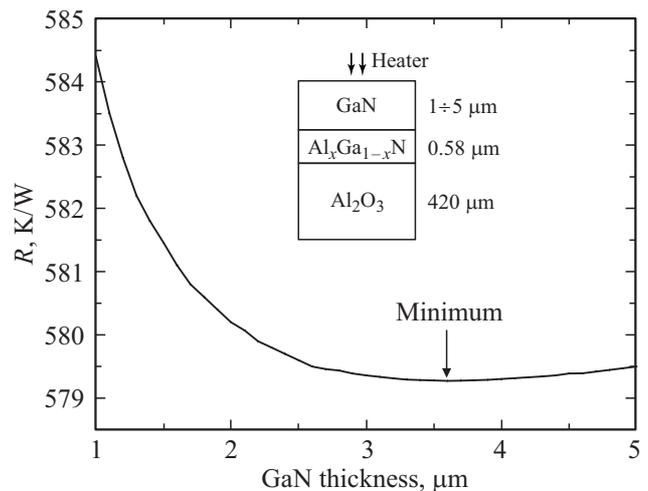


Рис. 5. Зависимость теплового сопротивления структуры $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ от толщины слоя нитрида галлия. Стрелкой отмечен минимум сопротивления при толщине $3.6\text{ }\mu\text{m}$. Вставка: схематичное изображение смоделированной структуры.

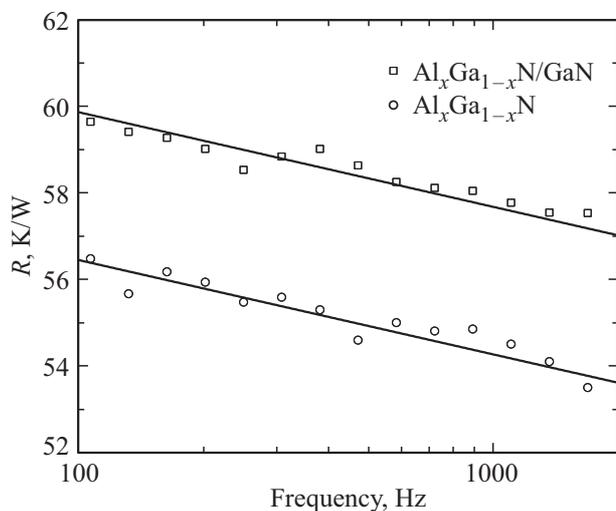


Рис. 3. Зависимость теплового сопротивления от частоты тока, протекающего через нагреватель, для нагревателей толщиной $20\text{ }\mu\text{m}$ на структурах $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ и $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$.

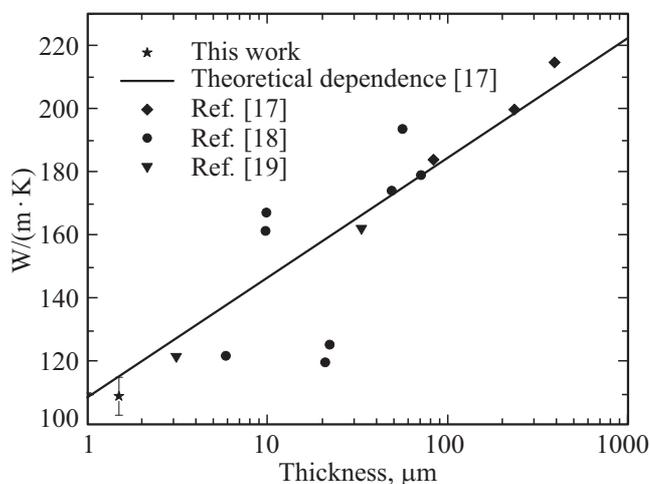


Рис. 4. Соотношение между теплопроводностью и толщиной пленки GaN при 300 K. Сплошная линия — теоретическая зависимость, предложенная в [17].

на длине $3.6\text{ }\mu\text{m}$ тепловое сопротивление структуры начинает расти из-за возрастающего теплового сопротивления непосредственно нитрида галлия. Можно заключить, что оптимальная толщина слоя нитрида галлия с точки зрения тепловой эффективности с учетом технологических особенностей роста составляет более $2\text{ }\mu\text{m}$.

4. Заключение

Проведены измерения абсолютной величины теплопроводности слоев, составляющих гетероструктуру $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. Измеренные значения составили $1.15 \pm 0.05\text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ для $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ и $109 \pm 6\text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ для GaN. Полученный результат хорошо согласуется с литературными экспериментальными данными и теоретическими моделями. Сравнение эксперимента с теоретическим значением теплопроводности сплава $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ позволяет заключить, что с точки зрения тепловых свойств справедливо приближение набора слоев $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ с разным содержанием алюминия эффективным слоем той же толщины со средневзвешенной массовой долей x . В результате моделирования теплопереноса в структуре определено, что при толщине слоя GaN в $3.6\text{ }\mu\text{m}$ общее тепловое сопротивление структуры минимально.

Финансирование

Работа выполнена при поддержке НИЦ „Курчатовский институт“ в части приготовления структур и проведения измерений теплопроводности, а также Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-07-00229) в части исследования теплопроводности.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Ю. Федоров. Электроника НТБ **2**, 92 (2011).
- [2] D. Maier, M. Alomari, N. Grandjean, J.-F. Carlin, M.-A. Forte-Poisson, C. Dua, A. Chuvilin, D. Troadec, C. Gaquière, U. Kaiser, S.L. Delage, E. Kohn. IEEE Trans. Dev. Mater. Rel. **10**, 427 (2010).
- [3] A. Jézowski, O. Churiukova, J. Mucha, T. Suski, I. Obukhov, B. Danilchenko. Mater. Res. Express **2**, 085902 (2015).
- [4] G.A. Slack, R.A. Tanzilli, R. Pohl, J. Vandersande. J. Phys. Chem. Solids **48**, 641 (1987).
- [5] W. Liu, A.A. Balandin. J. Appl. Phys. **97**, 073710 (2005).
- [6] C.A. Polanco, L. Lindsay. Phys. Rev. B **99**, 075202 (2019).
- [7] A. Sarua, H. Ji, K. Hilton, D. Wallis, M.J. Uren, T. Martin, M. Kuball. IEEE Trans. Electron Dev. **54**, 3152 (2007).
- [8] A. van Roekeghem, B. Vermeersch, J. Carrete, N. Mingo. Phys. Rev. Appl. **11**, 034036 (2019).
- [9] K. Park, C. Bayram. Appl. Phys. Lett. **109**, 151904 (2016).
- [10] D.G. Cahill. Rev. Sci. Instrum. **61**, 802 (1990).
- [11] D.A. Chernodoubov, A.V. Inyushkin. Rev. Sci. Instrum. **90**, 024904 (2019).
- [12] J. Alvarez-Quintana, J. Rodriguez-Viej. Sens. Actuat. A-Phys. **142**, 232 (2008).
- [13] B. Abeles. Phys. Rev. **131**, 1906 (1963).
- [14] P.G. Klemens. In: Solid State Phys. / Ed. F. Seitz, D. Turnbull. Academic Press, Inc., N.Y. (1958). V. 7. P. 1–98.
- [15] A. Jézowski, B. Danilchenko, M. Bóckowski, I. Grzegory, S. Krukowski, T. Suski, T. Paszkiewicz. Solid State Commun. **128**, 69 (2003).
- [16] R.R. Reeber, K. Wang. MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. **6** (2001).
- [17] C. Mion, J.F. Muth, E.A. Preble, D. Hanser. Appl. Phys. Lett. **89**, 092123 (2006).
- [18] D.I. Florescu, V.M. Asnin, F.H. Pollak, R.J. Molnar, C.E.C. Wood. J. Appl. Phys. **88**, 3295 (2000).
- [19] C. Luo, D.R. Clarke, J.R. Dryden. J. Electron. Mater. **30**, 138 (2001).

Редактор К.В. Емцев