

06

Пластическая релаксация напряженного полуполярного AlN(10 $\bar{1}$ 1) слоя, синтезированного на наноструктурированной Si(100) подложке

© В.Н. Бессолов, Е.В. Коненкова, В.Н. Пантелеев

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН
194021 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: lena.triat@mail.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 25 марта 2020 г.

В окончательной редакции 15 июня 2020 г.

Принято к публикации 30 июня 2020 г.

Методом растровой электронной микроскопии изучалась пластическая релаксация напряженного полуполярного AlN(10 $\bar{1}$ 1) слоя, синтезированного на наноструктурированной подложке Si(100). Показано, что в полуполярном AlN-слое применение нанорельефа, состоящего из треугольных наноканавок с наклонными гранями, близкими к плоскости Si(111), может приводить к формированию трещин только в направлении, перпендикулярном канавке. Модельные представления пластической релаксации напряженного полуполярного слоя основываются на сравнении величин порогового напряжения, выше которого возникают трещины, и термомеханических напряжений, возникающих из-за различия коэффициентов термического расширения AlN/Si-структуры.

Ключевые слова: полуполярный нитрид алюминия, наноструктурированная подложка кремния, релаксация напряженного слоя.

DOI: 10.21883/JTF.2020.12.50130.98-20

В последние несколько лет III-нитридам уделяется значительное внимание при изготовлении эффективных оптоэлектронных устройств [1]. Однако нитриды галлия и алюминия являются пьезоэлектрическими материалами, и использование (0001) плоскости в оптоэлектронных приборах приводит к проявлению эффекта Штарка, в связи с чем становится привлекательной замена в этих устройствах полярных слоев полуполярными или неполярными [2]. В настоящее время Si(100) считается перспективной подложкой для синтеза GaN-слоев из-за низкой цены, больших размеров, достаточно высокой теплопроводности и как подложка, имеющая потенциал для интеграции нитрид галлиевой и кремниевой оптоэлектроники. В настоящее время предпринимается попытка синтезировать полуполярные нитриды галлия и алюминия на подложках кремния [3], а также на темплейтах 3C-SiC/Si [4,5].

Однако из-за большого несоответствия решеток AlN и Si эпитаксиальные слои AlN, выращенные на Si-подложках, должны выдерживать большое растягивающее напряжение, которое может приводить к образованию трещин при охлаждении от температуры эпитаксии до комнатной температуры из-за различий в коэффициентах термического расширения между AlN и Si [6].

Процесс растрескивания полярных слоев GaN при эпитаксии на сапфировой подложке рассмотрен в [7]. При эпитаксии полярного GaN на кремниевой подложке образования трещин пытаются избежать путем использования микроструктурированной подложки Si(100) [8]. Однако особенностей возникновения трещин при формировании AlN-полуполярных слоев нам обнаружить в литературе не удалось.

Цель настоящей работы — выяснить условия возникновения пластической релаксации напряженного полуполярного AlN слоя на наноструктурированной подложке NP-Si(100) (NanoPatterned Si(100)). Для выполнения поставленной цели на подложке Si(100) с ориентацией поверхности $\pm 0.5^\circ$ по технологии Wostec [9] формировалась V-структурированная подложка со средним периодом $\lambda \approx 80$ nm, и высотой $h \approx 65$ nm (рис. 1, a). На вершинах кремниевых нанохребтов наклонно расположены нанополоски SiN, что придает нанозлементам некоторую степень асимметрии. Линейные участки боковых склонов наноканавок представлены гранями Si(111) с углом наклона к плоскости Si(100) около 54° .

Эпитаксиальный рост слоев AlN осуществлялся методом хлорид-гидридной газовой фазной эпитаксии (HVPE) при соотношении потоков в зоне роста $H_2/NH_3 = 2 : 1$ при температуре 1080°C аналогично [10]. Толщина слоев AlN была около $7.5 \mu\text{m}$. Структурные характеристики AlN выяснялись методом рентгенодифракционного анализа, сканирующей электронной микроскопии.

Рентгенодифракционный анализ показал, что слой AlN, синтезированный на V-структурированной подложке, имеет кристаллографическую плоскость (10 $\bar{1}$ 1) с $\omega_\Theta \sim 60$ arcmin.

Изображения, полученные при помощи сканирующего электронного микроскопа выявили, что, во-первых, в процессе HVPE синтеза V-структурированная поверхность кремния сохраняется (рис. 1, b), во-вторых, AlN(10 $\bar{1}$ 1) содержит сетку параллельных квазипериодических трещин, которые тянутся вдоль направления роста и строго перпендикулярно нанохребтам NP-Si(100) с расстоянием между ними $L = 135$ nm (рис. 2, a), и,

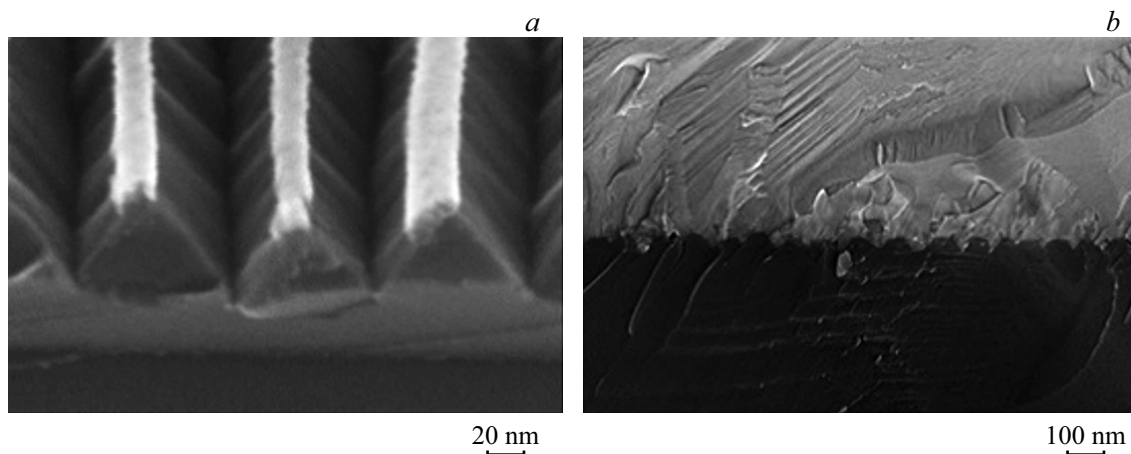


Рис. 1. РЭМ-изображения: *a* — исходного нанорельефа NP-Si(100), *b* — скола полуполярного AlN(10 $\bar{1}1$) на NP-Si(100) подложке.

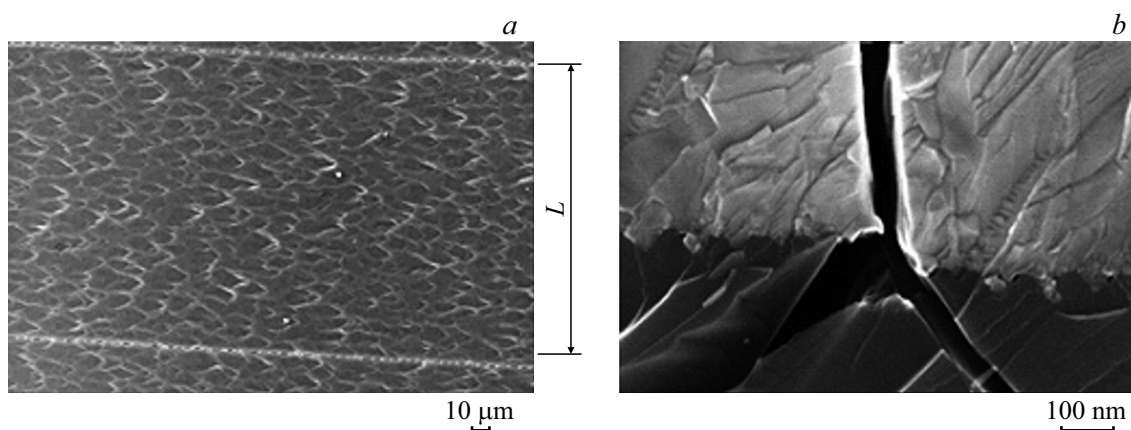


Рис. 2. РЭМ-изображение: *a* — поверхности полуполярного AlN(10 $\bar{1}1$) с квазипериодическими трещинами, *b* — скола структуры AlN/NP-Si(100) с трещиной.

в-третьих, трещина пронизывают не только слой AlN толщиной 7 μm, но частично проникает и в подложку Si на глубину 300 nm (рис. 2, *b*).

Для того чтобы образовалась трещина при охлаждении структуры, сохраненная упругая энергия должна превышать энергию, необходимую для создания новых поверхностей, образующих трещину.

Мы адаптировали модель, предложенную для образования трещин полярного GaN на сапфировой подложке [7], для объяснения условий возникновения трещин в полуполярном AlN-слое, синтезированном на NP-Si(100) подложке. Согласно модели, при выращивании толстых слоев при температуре эпитаксии происходит релаксация упругих напряжений — $\sigma_{\Delta\alpha}$, связанных с разницей постоянных решеток α_{AlN} и α_{Si} , но при охлаждении возникают напряжения растяжения, связанные с различием термических коэффициентов — $\sigma_{\Delta\alpha}$. Величину растягивающих упругих напряжений, при которых происходит возникновение трещин (σ_c), можно оценить, опираясь на экспериментально определенное расстояние между трещинами в AlN/NP-Si(100) —

$L = 135 \text{ nm}$ (рис. 2, *a*). Согласно [7]:

$$\sigma_c = \sqrt{5.8 \frac{\Gamma E_{\text{AlN}}}{L(1 - \nu_{\text{AlN}}^2)}}, \quad (1)$$

где $E_{\text{AlN}} = 225 \text{ GPa}$ для AlN/Si [11] и $\nu_{\text{AlN}} = 0.24$ — модуль Юнга и коэффициент Пуассона соответственно.

Параметр Γ — сопротивление разрушения — использовался для определения величины σ_c для слоев GaN, синтезированных на сапфировой подложке [7], однако значение этого параметра для AlN в литературе нам обнаружить не удалось. Поэтому мы оценили по формуле [7] параметр Γ для AlN, опираясь на литературные данные $\sigma_{\Delta\alpha}$ при переходе от упругой деформации к пластической, который происходит в тонком слое из-за разницы параметров решетки слоя и подложки при температуре эпитаксии

$$\Gamma = \frac{h_c z \sigma_{\Delta\alpha}^2 (1 - \nu_{\text{AlN}}^2)}{E_{\text{AlN}}}, \quad (2)$$

где $h_c = 2 \text{ nm}$ [12], $\sigma_{\Delta\alpha} = 0.625 \text{ GPa}$ [12], $Z = 1.976$ [13].

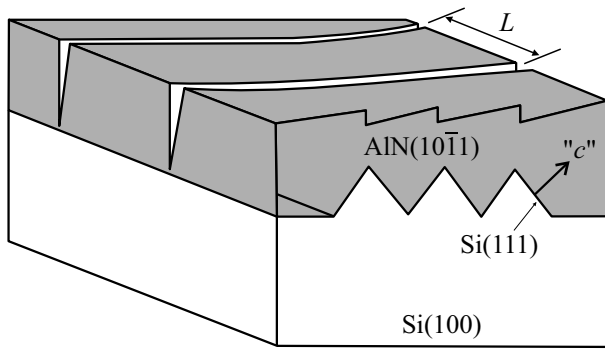


Рис. 3. Схематическое изображение трещин в структуре AlN/NP–Si(100).

Полученное значение $\Gamma = 0.0065 \text{ J/m}^2$ позволяет оценить критическое напряжение в растягивающем слое при образовании трещин $\sigma_c = 0.26 \text{ GPa}$.

Сравним это значение с упругими напряжениями $\sigma_{\Delta\alpha}$, которые могут возникнуть в толстом слое AlN при охлаждении структуры от температуры эпитаксии $T_1 = 1080^\circ\text{C}$ до комнатной температуры $T_2 = 25^\circ\text{C}$ по формуле [14]:

$$\sigma_{\Delta\alpha} = \frac{E_{\text{AlN}}}{1 - \nu_{\text{AlN}}} \frac{\Delta\alpha\Delta T}{1 + \frac{E_{\text{AlN}}(1 - \nu_{\text{Si}})h_{\text{AlN}}}{E_{\text{Si}}(1 - \nu_{\text{AlN}})h_{\text{Si}}}}, \quad (3)$$

где $h_{\text{Si}} = 400 \mu\text{m}$, $h_{\text{AlN}} = 7.5 \mu\text{m}$ — толщины подложки Si и слоя AlN соответственно, $\alpha_{\text{Si}} = 3.6 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, $\alpha_{\text{AlN}} = 5.3 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ [15] — коэффициенты термического расширения подложки и слоя соответственно, $E_{\text{Si}} = 131 \text{ GPa}$ для Si(111) и $\nu_{\text{Si}} = 0.26$ — модуль Юнга и коэффициент Пуассона соответственно.

Оказалось, что величина $\sigma_{\Delta\alpha} = 0.5 \text{ GPa}$ значительно выше σ_c . Образование трещин в AlN и Si, по-видимому, произошло в результате резкой пластической релаксации в процессе охлаждения, что подтверждается видом трещин (рис. 2, b).

Мы полагаем, что применение наноструктурированной V-образной поверхности Si(100) с гранями Si(111) приводит в методе HVPE к росту полуполярного AlN-слоя [10], в котором при формировании AlN на грани Si(111) направление „с“ гексагонального кристалла AlN перпендикулярно плоскости Si(111) (рис. 3). Как известно [5], полуполярные слои, синтезированные на подложке Si(100), испытывают анизотропную деформацию, но, поскольку в направлении вдоль „хребтов“ размер плоскости Si(111) существенно превышает L , упругие напряжения превысят пороговые и возникнет система квазитрещин (рис. 3), а в перпендикулярном направлении этого не произойдет, поскольку размер грани Si(111) ($\sim 100 \text{ nm}$) меньше величины L .

Следует отметить, что формула (1), которая связывает критическое значение напряжений от параметров слоя, была получена графически и поэтому имеет необычный множитель 5.8. Однако полезность формулы трудно

переоценить для технологии эпитаксиальных слоев на структурированных (не плоских) подложках, например, при выращивании полуполярных структур на кремнии. Отметим, что величину $\sigma_{\Delta\alpha}$, которую мы использовали в формуле (2), определяют из рамановских измерений и она содержит компоненту, связанную с охлаждением структуры от температуры эпитаксии до комнатной.

Таким образом, образование трещин в полуполярном AlN слое, синтезированном на NP–Si(100), происходит только в направлении, перпендикулярном V-образной канавке, причем растягивающие напряжения в слое AlN(10 $\bar{1}1$), возникающие при охлаждении гетероструктуры, составляют величину $\sigma_{\Delta\alpha} \sim 0.5 \text{ GPa}$, которая выше пороговых напряжений для образования трещин $\sigma \sim 0.26 \text{ GPa}$. Оценка показывает, что при равных толщинах слоя AlN и подложки Si будет выполняться условие $\sigma_{\Delta\alpha} < \sigma_c$, что позволит избежать образования трещин.

Благодарности

Авторы благодарят компанию ООО „Квантовый кремний“ (Москва, Россия) за предоставление наноструктурированных подложек Si(100), а также В.К. Смирнова за полезные дискуссии.

Финансирование работы

Исследования частично выполнены при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-08-00096.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Z. Li, B. Feng, B. Deng, L. Liu, Y. Huang, M. Feng, Y. Zhou, H. Zhao, Q. Sun, H. Wang, X. Yang, H. Yang. *J. Semicond.*, **39**, 044002 (2018). DOI: 10.1088/1674-4926/39/4/044002
- [2] F. Scholz, T. Meisch, K. Elkhouchy. *Phys. Status Solidi A*, **213**, 3117 (2016). DOI: 10.1002/pssa.201600340
- [3] J.-M. Liu, J. Zhang, W.-Y. Lin, M.-X. Ye, X.-X. Feng, D.-Y. Zhang, S. Dinga, Ch.-K. Xu, B.-L. Liu. *Chin. Phys. B*, **24**, 57801 (2015).
- [4] D.V. Dinh, S. Presa, M. Akhter, P.P. Maaskant, B. Corbett, P.J. Parbrook. *Semicond. Sci. Technol.*, **30**, 125007 (2015). DOI: 10.1088/0268-1242/30/12/125007
- [5] V. Bessolov, A. Kalmykov, E. Konenkova, S. Kukushkin, A. Myasoedov, N. Poletaev, S. Rodin. *J. Cryst. Growth*, **457**, 202 (2017). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2016.05.025
- [6] M.A. Mastro, C.R. Eddy, Jr., D.K. Gaskill, N.D. Bassim, J. Casey, A. Rosenberg, R.T. Holm, R.L. Henry, M.E. Twigg. *J. Cryst. Growth*, **287**, 610 (2006). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2005.10.119
- [7] E.V. Etzkom, D.R. Clarke. *J. Appl. Phys.*, **89** (2), 1025 (2001).
- [8] K.K. Anshah-Antwi, C.B. Soh, H. Liu, S.J. Chua. *J. Vac. Sci. Technol. A*, **33**, 061517 (2015).

- [9] V.K. Smirnov, D.S. Kibalov, O.M. Orlov, V.V. Graboshnikov. *Nanotechnology*, **14**, 709 (2003). DOI: 10.1088/0957-4484/14/7/304
- [10] В.Н. Бессолов, М.Е. Компан, Е.В. Коненкова, В.Н. Пантелеев. *Письма в ЖТФ*, **46** (2), 12 (2020). DOI: 10.21883/PJTF.2020.02.48944.18061 [V.N. Bessolov, M.E. Kompan, E.V. Konenkova, V.N. Panteleev. *Tech. Phys. Lett.*, **46**, 59 (2020). DOI: 10.1134/S1063785020010174]
- [11] Sh.-R. Jian, J.-Y. Juang. *J. Nanomaterials*, **2012**, 914184 (2012). DOI: 10.1155/2012/914184
- [12] A. Pandey, S. Dutta, R. Prakash, R. Raman, A.K. Kapoor, D. Kaur. *J. Electr. Materials*, **47**, 1405 (2018). DOI: 10.1007/s11664-017-5924-8
- [13] J.W. Hutchinson, Z. Suo. *Advanc. Appl. Mechanics*, **29**, 63 (1992). DOI: 10.1016/S0065-2156(08)70164-9
- [14] P.R. Tavernier, B. Imer, S.P. DenBaars, D.R. Clarke. *Appl. Phys. Lett.*, **85** (20), 4630 (2004). DOI: 10.1063/1.1818736
- [15] W.M. Yim, R.J. Paff. *J. Appl. Phys.*, **45** (3), 1456 (1974). DOI: 10.1063/1.1663432