

## Анализ механических напряжений в гетероструктурах на основе GaN на кремниевых подложках

© Д.С. Артеев<sup>1</sup>, А.В. Сахаров<sup>1</sup>, Е.Е. Заварин<sup>1</sup>, А.Е. Николаев<sup>1</sup>, М.А. Яговкина<sup>1</sup>, А.Ф. Цацульников<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Научно-технологический центр микроэлектроники и субмикронных гетероструктур  
Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: ArteevDS@mail.ioffe.ru

Поступила в Редакцию 19 мая 2023 г.

В окончательной редакции 1 августа 2023 г.

Принята к публикации 30 октября 2023 г.

На основании данных *in situ* рефлекто-/дефлектометрии были исследованы упругие напряжения в слоях AlN на подложках кремния различной толщины, а также в многослойных (Al,Ga)N-структурах, выращенных на виртуальных подложках AlN/Si. Установлено, что в процессе роста AlN возникают напряжения растяжения, величина которых тем больше, чем толще подложка. В процессе роста многослойных структур (Al,Ga)N со ступенчато уменьшающимся содержанием Al все слои испытывают напряжения сжатия, которые уменьшаются по направлению к поверхности. При постростовом охлаждении структур до комнатной температуры часть нижних слоев AlGaN остается полностью в сжатом состоянии, а часть испытывает как напряжения сжатия (в нижней части слоя), так и растяжения (в верхней части слоя).

**Ключевые слова:** нитрид галлия, кремний, кривизна, упругие напряжения.

DOI: 10.61011/FTR.2023.07.56787.5196C

Транзисторы с высокой подвижностью электронов на основе III-V соединений все больше становятся частью современной электроники, постепенно вытесняя существующие приборы на основе кремния. Нитрид галлия обладает уникальной совокупностью свойств, таких как большая ширина запрещенной зоны (3.4 эВ, в 3 раза больше, чем у кремния), высокая насыщенная скорость электронов ( $\sim 2.5 \cdot 10^7$  см/с) [1], большая пробивная напряженность электрического поля ( $> 3$  МВ/см) [2] и относительно высокая подвижность ( $\sim 2500$  см<sup>2</sup>/(В·с)) двумерного электронного газа на гетерогранице Al(Ga)N/GaN [3]. Благодаря этим свойствам на основе III-N гетероструктур возможно создание высокоэффективных [4] и высокочастотных [5] приборов.

Из-за отсутствия недорогих подложек GaN большого диаметра большинство структур на основе III-N выращивается гетероэпитаксиально на подложках карбида кремния или сапфира. Рост также возможен и на подложках кремния, которые обладают рядом преимуществ, а именно значительно более низкой ценой, относительно хорошей теплопроводностью и коммерческой доступностью подложек диаметром до 450 мм [6]. Однако серьезным недостатком этих подложек является сильное рассогласование параметров кристаллических решеток кремния и III-N соединений, а также большая разница в коэффициентах теплового расширения (КТР), что приводит к большой плотности дислокаций и растрескиванию выращенной структуры при охлаждении от температуры эпитаксиального роста ( $\sim 1000^\circ\text{C}$  при росте GaN методами газовой эпитаксии и  $600\text{--}800^\circ\text{C}$  при росте методом молекулярно-пучковой эпитаксии) до комнатной

температуры и ограничивает максимально возможную толщину слоя GaN. Одним из способов преодолеть данное ограничение является использование переходных буферных слоев AlGaIn различного состава [7].

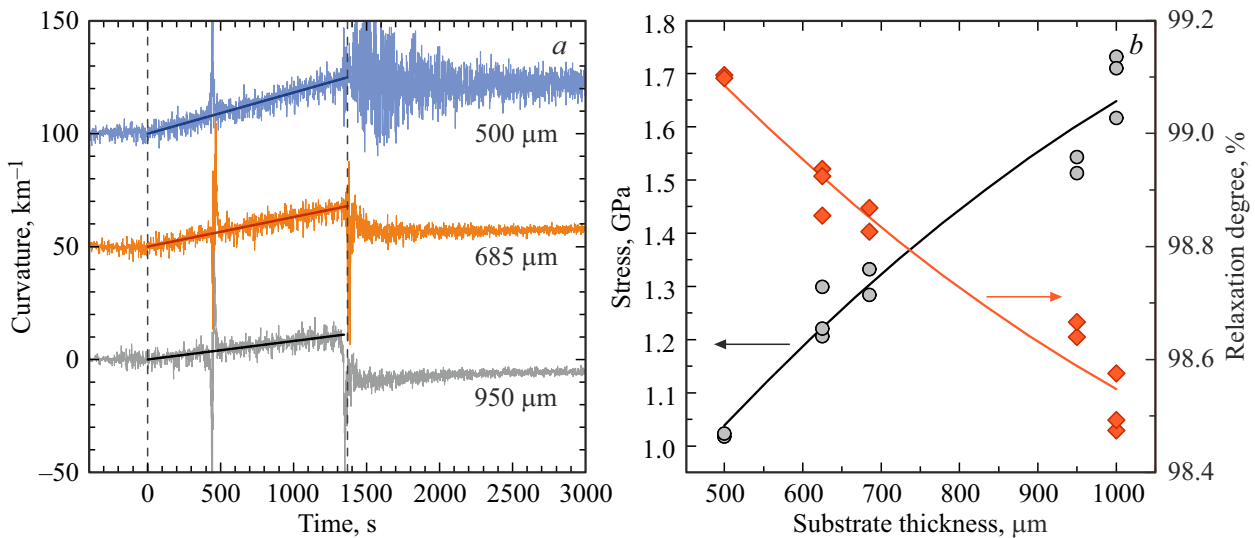
В данной работе представлены результаты анализа упругих напряжений, возникающих при росте III-N слоев на подложках кремния Si(111).

Исследуемые структуры были выращены методом газовой эпитаксии из металлорганических соединений на установке Dragon-125 с горизонтальным реактором. Установка оснащена системой лазерной рефлекто-/дефлектометрии, позволяющей *in situ* контролировать скорость роста слоев и изменение кривизны структуры. Триметилгаллий, триметилалюминий и аммиак использовались в качестве прекурсоров. Ферроцен и пропан использовались в качестве источников легирующих примесей железа и углерода соответственно. Водород, азот и их смеси выступали в качестве газов-носителей.

Сначала был выращен набор так называемых виртуальных подложек („темплейтов“), представляющих собой  $\sim 215$  нм слои AlN на кремниевых подложках различной толщины. Рост происходил при температуре  $1100^\circ\text{C}$ . Значения упругих напряжений  $\sigma_f$  в слоях определялись с помощью формулы Стоуни:

$$\kappa = \frac{6M_f \varepsilon_f h_f}{M_s h_s^2} = \frac{6\sigma_f h_f}{M_s h_s^2}, \quad (1)$$

где  $\kappa$  — кривизна,  $M_{f,(s)}$  — биаксиальный модуль упругости,  $h_{f,(s)}$  — толщина слоя (подложки), при этом  $h_f = G_f t$ , где  $G_f$  — скорость роста слоя. Здесь и далее значения всех необходимых параметров были взяты из



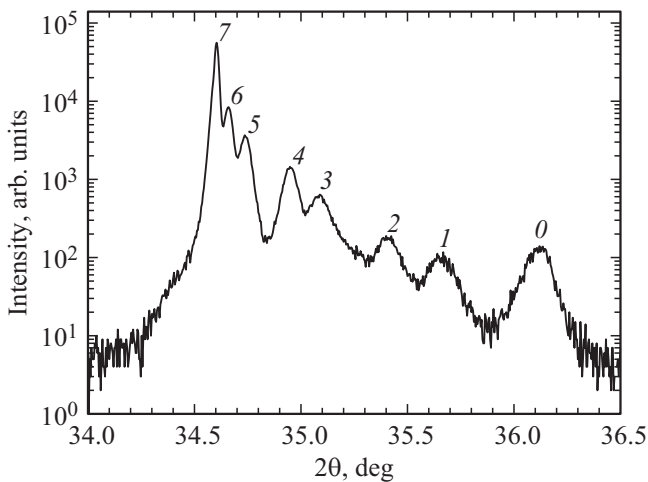
**Рис. 1.** *a* — изменения кривизны подложки при росте слоя AlN на кремниевых подложках толщиной 950, 685 и 500 мкм. Зависимости сдвинуты по вертикали для лучшего представления. Штриховыми вертикальными линиями обозначены начало и конец процесса роста слоя. *b* — зависимость величины упругих напряжений и степени пластической релаксации слоя AlN от толщины подложки.

работы [8]. С другой стороны, напряжения, вызванные рассогласованием параметров кристаллической решетки  $a$ , можно записать как  $\varepsilon_f = (a_s - a_f)/a_s(1 - r)$ , где  $r$  — степень пластической релаксации. Изменение кривизны в процессе роста слоя AlN для образцов, выращенных на подложках толщиной 950, 685, 500 мкм, представлено на рис. 1, *a*. Полученные значения упругих напряжений  $\sigma_f$  и степени релаксации  $r$  слоев AlN, выращенных на подложках различной толщины, представлены на рис. 1, *b*. Видно, что величина растягивающих напряжений тем больше, чем толще подложка, при этом степень релаксации, наоборот, меньше. Для слоя AlN, выращенного на подложке толщиной 500 мкм, упругое напряжение составляет 1.02 ГПа, что хорошо согласуется со значением  $\sim 1.2$  ГПа из работы [9] для слоя, выращенного на кремниевой подложке той же толщины при схожих условиях роста. В работе [10] также сообщалось, что величина напряжений в слое AlN, выращенном методом молекулярно-пучковой эпитаксии на подложке толщиной 300 мкм, составляет 0.5–0.7 ГПа. Генерацию таких растягивающих напряжений связывают с коалесценцией островков в слое, растущем по механизму Фольмера–Вебера [11,12]. Однако, по данным рефлектометрии, никаких признаков островкового роста не наблюдается, поэтому если он и имеет место, то только на самых ранних этапах роста, и разрешение нашего оборудования (при данной скорости роста) не позволяет наблюдать данный эффект. Причина зависимости напряжений от толщины подложки также неясна.

На этих AlN/Si-темплейтах были выращены многослойные (Al,Ga)N-структуры. Сначала при температуре 1050°C осаждалось шесть слоев AlGaN (AlGaN1, AlGaN2, ..., AlGaN6) со ступенчато уменьшающейся

мольной долей алюминия (0.76/0.62/0.40/0.29/0.14/0.06), легированных железом. Для улучшения морфологии слоя были солегированы углеродом [13]. Затем при той же температуре происходил рост буферного слоя GaN:Fe,C (LT-GaN). После при температуре 1100°C осаждался высокотемпературный нелегированный GaN-слой (HT-GaN). Буферные слои, легированные железом, широко используются в транзисторах с высокой подвижностью электронов на основе GaN, при этом оптимально подобранная толщина нелегированного слоя (канала) позволяет получить высокие пробойные напряжения без значительного ухудшения свойств двумерного электронного газа, вызванного проникновением атомов железа в подканальную область из-за так называемого „эффекта памяти“ [14,15]. Более подробно условия роста описаны в работе [16]. На рис. 2 представлена кривая качания, полученная методом рентгеноструктурного анализа подобной многослойной структуры, на которой хорошо различимы восемь отдельных пиков, соответствующих слоям разного состава.

Зависимости изменения кривизны структур в процессе роста на AlN/Si темплейтах, выращенных на подложках толщиной 950 и 685 мкм, показаны на рис. 3, *a* (в процессе роста на более тонком темплейте на подложке 500 мкм имела место пластическая деформация кремния, поэтому данная структура не анализировалась и не приведена здесь). Аналогично росту слоев AlN большее изменение кривизны наблюдается для роста на более тонком темплейте. Однако внутри каждого отдельного слоя изменение кривизны нелинейно по времени (т.е. по толщине слоя), поэтому для анализа данных структур был применен подход из работы [17], в ходе которого изменения кривизны структуры в пределах



**Рис. 2.** Кривая качания многослойной (Al,Ga)N-структуры. Пики соответствуют слоям: 0 — AlN; 1, 2, ..., 6 — AlGaN1, AlGaN2, ..., AlGaN6; 7 — GaN.

каждого слоя аппроксимировались квадратичной функцией  $\kappa = A + B_1 h_f + B_2 h_f^2$ . Тогда распределения упругих напряжений в каждом слое выражаются как

$$\sigma_f(h_f) = \frac{M_s h_s^2}{6} B_1 + \frac{M_s h_s^2}{3} h_f B_2 + \frac{h_s h_f (2M_f - M_s)}{3} B_1. \quad (2)$$

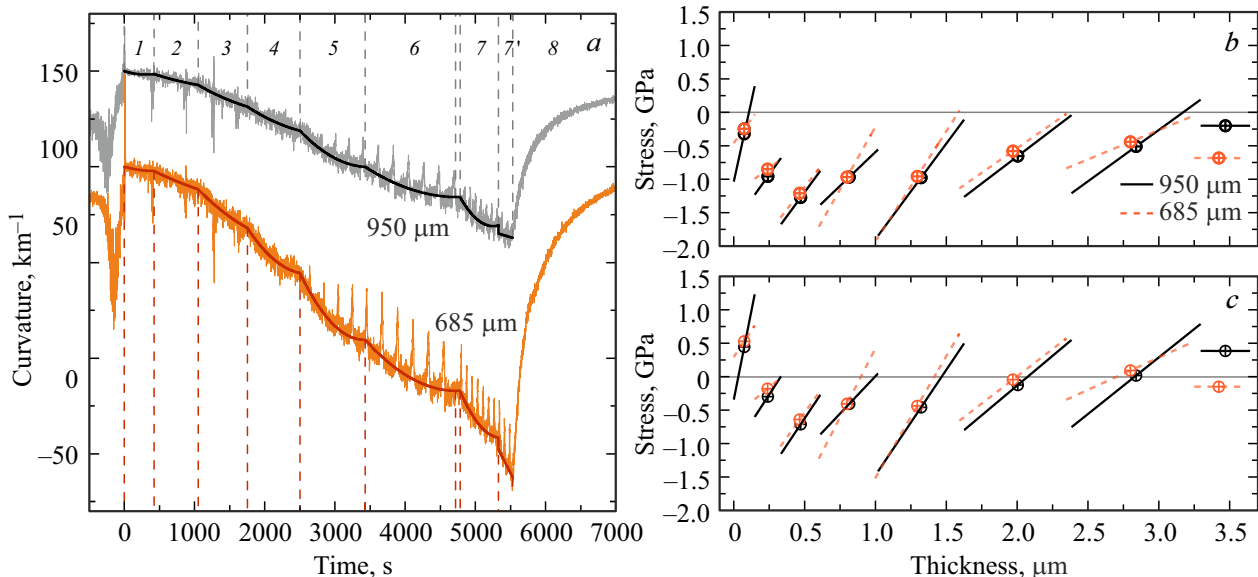
Аппроксимированные квадратичной функцией кривые также приведены на рис. 3, а. Рассчитанное распределение упругих напряжений в слоях при температурах

роста показано на рис. 3, б. Символами отмечены средние значения напряжений в пределах каждого слоя. В процессе роста все слои практически полностью находятся в сжатом состоянии, причем по мере роста слоя происходит его постепенная релаксация, т. е. часть слоя, находящаяся ближе к поверхности, становится менее напряженной (вплоть до практически ненапряженного состояния для низкосоставных слоев AlGaN5 и AlGaN6 и LT-GaN). Релаксация напряжений происходит путем аннигиляции и наклона дислокаций [18]. В среднем, слои на более тонком темплейте находятся в чуть менее напряженном состоянии, хотя разница между структурами не существенна. Исключение составляет только верхний слой HT-GaN, который существенно сильнее сжат в структуре, выращенной на более тонком темплейте.

Как было упомянуто выше, кремний и III-N материалы обладают сильно отличающимися КТР, что приводит к генерации дополнительных упругих напряжений при постростовом охлаждении структуры. В приближении нулевого порядка суммарные упругие напряжения при комнатной температуре в каждом слое можно вычислить как

$$\sigma_f(T_{RT}) = \sigma_f(T_{\text{growth}}) + M_f \int_{T_{\text{growth}}}^{T_{RT}} [\alpha_s(T) - \alpha_f(T)] dT, \quad (3)$$

где  $\alpha_{f,(s)}$  — КТР слоя (подложки). Из рис. 3, с видно, что после охлаждения слой AlGaN1 в среднем является растянутым, промежуточные слои AlGaN2, AlGaN3, AlGaN4 и AlGaN5 остались в сжатом состоянии, а



**Рис. 3.** а — изменение кривизны гетероструктур при росте на AlN/Si-темплейтах, выращенных на подложках толщиной 950 и 685 мкм. Зависимости сдвинуты по вертикали для лучшего представления. Штриховыми вертикальными линиями обозначены начало и конец процесса роста отдельных слоев: 1, 2, ..., 6 — AlGaN1, AlGaN2, ..., AlGaN6; 7 и 7' — LT-GaN и HT-GaN; 8 — постростовое охлаждение. б — распределение упругих напряжений по толщине при температуре роста. в — распределение упругих напряжений по толщине после охлаждения до комнатной температуры. (Цветной вариант рисунка представлен в электронной версии статьи).

AlGaIn и LT-GaN практически не напряжены. Интересно, что в структуре на толстом темплайте слой HT-GaN получился растянутым, при том что в структуре на тонком темплайте он находится в слегка сжатом состоянии. Кроме того, почти во всех слоях наблюдаются отдельные области, испытывающие растяжение, что согласуется с расчетами распределения упругих напряжений в номинально сжатом GaN на AlGaIn [19]. Это потенциально может приводить к растрескиванию структуры через какое-то время, поэтому для получения надежных и долговечных приборов на основе подобных гетероструктур необходима тщательная оптимизация составов и толщин переходных слоев AlGaIn.

Таким образом, в данной работе по данным *in situ* лазерной рефлекто-/дефлектометрии были исследованы упругие напряжения в слоях AlN при росте на подложках кремния различной толщины, а также при росте многослойных буферных слоев AlGaIn переменного состава на полученных виртуальных подложках AlN/Si. Установлено, что в процессе роста слои AlN испытывают напряжения растяжения. Возникающие растягивающие напряжения тем больше, тем толще подложка. В процессе роста многослойной (Al,Ga)N-структуры со ступенчато уменьшающимся составом все слои испытывают напряжения сжатия, при этом наблюдается уменьшение напряженности слоя по направлению к поверхности. Это свидетельствует о релаксации напряжений сжатия путем наклона и изменения плотности дислокаций. Существенной разницы в величине упругих напряжений слоев, выращенных на толстом и тонком темплайте не наблюдается, за исключением последнего высоко-температурного слоя GaN. При охлаждении структур от температуры роста до комнатной температуры часть нижних слоев AlGaIn остается полностью в сжатом состоянии, а часть испытывает как напряжение сжатия (в нижней части слоя), так и растяжения (в верхней части слоя). Такое распределение напряжений потенциально может приводить к растрескиванию структуры через какое-то время, поэтому для получения надежных и долговечных приборов на основе подобных гетероструктур необходима тщательная оптимизация составов и толщин переходных слоев AlGaIn.

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] J. Khurgin, Y.J. Ding, D. Jena. Appl. Phys. Lett., **91**, 252104 (2007). DOI: 10.1063/1.2824872
- [2] V.A. Dmitriev, K.G. Irvine, C.H. Carter, N.I. Kuznetsov, E.V. Kalinina. Appl. Phys. Lett., **68**, 229 (1996). DOI: 10.1063/1.116469
- [3] L. Yang, X. Wang, T. Wang, J. Wang, W. Zhang, P. Quach, P. Wang, F. Liu, D. Li, L. Chen, S. Liu, J. Wei, X. Yang, F. Xu, N. Tang, W. Tan, J. Zhang, W. Ge, X. Wu, C. Zhang, B. Shen. Adv. Funct. Mater., **30**, 2004450 (2020). DOI: 10.1002/adfm.202004450
- [4] C.-T. Ma, Z.-H. Gu. Electronics, **8**, 1401 (2019). DOI: 10.3390/electronics8121401
- [5] M. Haziq, S. Falina, A.A. Manaf, H. Kawarada, M. Syamsul. Micromachines, **13**, 2133 (2022). DOI: 10.3390/mi13122133
- [6] Silicon Wafer 18inch Double Sided Polish P110 1 ~ 50Ω. URL: <https://www.fuledalink.com/products/18inch-silicon-wafer-dsp> (accessed May 16, 2023).
- [7] S. Tripathy, V.K.X. Lin, S.B. Dolmanan, J.P.Y. Tan, R.S. Kajen, L.K. Bera, S.L. Teo, M.K. Kumar, S. Arulkumar, G.I. Ng, S. Vicknesh, S. Todd, W.Z. Wang, G.Q. Lo, H. Li, D. Lee, S. Han. Appl. Phys. Lett., **101**, 082110 (2012). DOI: 10.1063/1.4746751
- [8] Y. Dai, S. Li, H. Gao, W. Wang, Q. Sun, Q. Peng, C. Gui, Z. Qian, S. Liu. J. Mater. Sci. Mater. Electron., **27**, 2004 (2016). DOI: 10.1007/s10854-015-3984-1
- [9] S. Raghavan, J.M. Redwing. J. Cryst. Growth, **261**, 294 (2004). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2003.11.020
- [10] D.S. Zolotukhin, D.V. Nechaev, S.V. Ivanov, V.N. Zhmerik. Techn. Phys. Lett., **43**, 262 (2017). DOI: 10.1134/S1063785017030130
- [11] J.A. Floro, E. Chason, R.C. Cammarata, D.J. Srolovitz. MRS Bulletin, **27**, 19 (2002). DOI: 10.1557/mrs2002.15
- [12] B.W. Sheldon, A. Rajamani, A. Bhandari, E. Chason, S.K. Hong, R. Beresford. J. Appl. Phys., **98**, 043509 (2005). DOI: 10.1063/1.1994944
- [13] В.В. Лундин, А.В. Сахаров, Е.Е. Заварин, Д.А. Закгейм, Е.Ю. Лундина, П.Н. Брунков, А.Ф. Цацунников. Письма ЖТФ, **45**, 36 (2019). DOI: 10.21883/PJTF.2019.14.48022.17738
- [14] D.S. Arteev, A.V. Sakharov, W.V. Lundin, E.E. Zavarin, D.A. Zakheim, A.F. Tsatsulnikov, M.I. Gindina, P.N. Brunkov. J. Phys.: Conf. Ser., **1697**, 012206 (2020). DOI: 10.1088/1742-6596/1697/1/012206
- [15] D.S. Arteev, A.V. Sakharov, W.V. Lundin, E.E. Zavarin, A.E. Nikolaev, A.F. Tsatsulnikov, V.M. Ustinov. Materials, **15**, 8945 (2022). DOI: 10.3390/ma15248945
- [16] A.V. Sakharov, D.S. Arteev, E.E. Zavarin, A.E. Nikolaev, W.V. Lundin, N.D. Prasolov, M.A. Yagovkina, A.F. Tsatsulnikov, S.D. Fedotov, E.M. Sokolov, V.N. Statsenko. Materials, **16**, 4265 (2023). DOI: 10.3390/ma16124265
- [17] A. Krost, A. Dadgar, G. Strassburger, R. Clos. Phys. Status Solidi A, **200**, 26 (2003). DOI: 10.1002/pssa.200303428
- [18] S. Raghavan, I.C. Manning, X. Weng, J.M. Redwing. J. Cryst. Growth, **359**, 35 (2012). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2012.08.020
- [19] M.E. Rudinsky, E.V. Yakovlev, W.V. Lundin, A.V. Sakharov, E.E. Zavarin, A.F. Tsatsulnikov, L.E. Velikovskiy. Phys. Status Solidi A, **213**, 2759 (2016). DOI: 10.1002/pssa.201600210

Редактор А.Н. Смирнов

## Stress analysis of GaN-based heterostructures on silicon substrates

*D.S. Arteev<sup>1</sup>, A.V. Sakharov<sup>1</sup>, E.E. Zavarin<sup>1</sup>,  
A.E. Nikolaev<sup>1</sup>, M.A. Yagovkina<sup>1</sup>, A.F. Tsatsulnikov<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> Ioffe Institute,

194021 St. Petersburg, Russia

<sup>2</sup> Submicron Heterostructures for Microelectronics,

Research & Engineering Center,

Russian Academy of Sciences,

194021 St. Petersburg, Russia

**Abstract** Elastic stresses in AlN layers on silicon substrates of different thickness, as well as in multilayer (Al,Ga)N structures grown on AlN/Si templates, were investigated based on in-situ reflectometry/deflectometry data. It was found that tensile stresses arise during the growth of AlN, with their magnitude increasing with thicker the substrate. During the growth of multilayer step-graded (Al,Ga)N structures, all layers underwent compressive stress which decreased towards the surface. After cooling the structures to room temperature, some of the lower AlGaIn layers remained entirely compressed, while another part experienced both compressive (in the lower part of each layer) and tensile (in the upper part of each layer) stresses.