

Исследования наноразмерных колончатых гетероструктур $Al_xGa_{1-x}N/AlN$, выращенных на подложках кремния с различными модификациями поверхности

© П.В. Середин,¹ А.М. Мизеров,² Н.А. Курило,¹ С.А. Кукушкин,^{2,3} Д.Л. Голощапов,¹ Н.С. Буйлов,¹
А.С. Леньшин,¹ Д.Н. Нестеров,¹ М.С. Соболев,² С.Н. Тимошнев,² К.Ю. Шубина²

¹ Воронежский государственный университет,
394018 Воронеж, Россия

² Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия

³ Институт проблем машиноведения РАН,
199178 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: paul@phys.vsu.ru

Поступило в Редакцию 23 мая 2023 г.

В окончательной редакции 8 сентября 2023 г.

Принято к публикации 23 октября 2023 г.

Методом молекулярно-пучковой эпитаксией с плазменной активацией азота исследован рост наноразмерных колончатых гетероструктур $Al_xGa_{1-x}N/AlN$ на поверхности подложек кремния трех типов. Показано, что эпитаксиальный рост зародышевого слоя AlN в N -обогащенных условиях приводит к формированию $Al_xGa_{1-x}N/AlN$ -гетероструктур с Ga -полярной поверхностью только на подложке $SiC/por-Si/c-Si$; на подложках $c-Si$ и $por-Si/c-Si$ слой $Al_xGa_{1-x}N$ находится в состоянии неупорядоченного твердого раствора с избыточным содержанием атомов галлия. Продемонстрировано, что наноразмерные колонки $Al_xGa_{1-x}N$, сформированные на $SiC/por-Si/c-Si$ -подложке, имеют наклон относительно c -оси, что связано с особенностями формирования слоя SiC . Оптические исследования показали, что оптический переход зона–зона для твердого раствора $Al_xGa_{1-x}N$ с $E_g = 3.99$ eV наблюдался только при исследовании гетероструктуры, выращенной на подложке $SiC/por-Si/c-Si$. Предложена качественная модель, объясняющая различие в формировании слоев $Al_xGa_{1-x}N$ на подложках $c-Si$, $por-Si/c-Si$ и $SiC/por-Si/c-Si$.

Ключевые слова: наноразмерные колончатые гетероструктуры $Al_xGa_{1-x}N/AlN$, эпитаксиальный рост, пористый кремний, карбид кремния, податливая подложка.

DOI: 10.61011/JTF.2024.01.56912.135-23

Введение

Активное развитие подходов эпитаксиального роста гетероструктур на основе полупроводниковых соединений нитридов третьей группы ($A_{III}N$) позволяет проектировать и изготавливать устройства, охватывающие большой спектр применения: СВЧ транзисторы с высокой подвижностью электронов (HEMT), светодиоды в УФ, видимой и ИК областях спектра (LED), детекторы для модулируемого по напряжению источника света и т.д. [1,2]. При этом интеграция $A_{III}N$ полупроводниковых материалов с кремниевой схемой обработки сигнала открывает широкое поле для появления новых функциональных устройств [3–5]. В частности, создание источников электромагнитного излучения на основе нитридных соединений, сформированных на подложке кремния, может позволить значительно расширить возможности кремниевой фотоники и запустить оптическую передачу данных прямо внутри микросхем [6].

Отсутствие полярности у подложек Si позволяет выращивать на ней как Ga -, так и N -полярные структуры на основе GaN . Хорошо известно, что в большинстве приборных структур обычно используются двумерные

Ga -полярные гетероструктуры, выращенные газофазной эпитаксией из металл-органических соединений (ГФ-ЭМОС) [7], так как они обычно имеют лучшие морфологические и электрофизические характеристики. Однако существует целый ряд приложений, где N -полярные соединения имеют преимущества [8,9]. По этой причине последнее время все больше внимания уделяется вопросам управления полярностью при эпитаксиальном синтезе соединений $A_{III}N$. Нами уже была показана возможность выращивания слоев GaN как с Ga -, так и с N -полярностью на кремниевых подложках методом молекулярно-пучковой эпитаксии с плазменной активацией азота (МПЭ ПА) [10]. Кроме того, в работе [9] нами была показана потенциальная возможность отделения верхнего толстого Ga -полярного слоя GaN , выращенного хлорид-гидридной эпитаксией от подложки $SiC/Si(111)$ посредством вытравливания промежуточного слоя GaN с противоположной N -полярностью, синтезированного методом МПЭ ПА.

Однако проблемы монолитной интеграции фотонных устройств на основе нитридов третьей группы с подложками кремния до настоящего времени не решены. Недавние исследования показывают, что некоторые из

этих фундаментальных проблем потенциально могут быть решены с помощью $Al_{III}N$ наноразмерных структур (нановискеры, нанокристаллы, нанокolonки), которые эпитаксиально выращиваются на решеточно рассогласованных подложках, таких, как кремний и сапфир, и имеют относительно высокое кристаллическое качество благодаря эффективной релаксации упругих напряжений за счет трехмерного островкового роста [11].

Известно, что технология МПЭ ПА позволяет использовать различные стехиометрические условия роста, характеризующиеся отношением интенсивностей потоков атомов третьей группы (F_{III}) и активированного азота (F_N), поступающими на ростовую поверхность, и формировать слои $Al_{III}N$ как с нанокolonчатой, так и с гладкой морфологией без предэпитаксиального маскирования подложки Si(111) [12]. Однако также известно, что в промышленных установках МПЭ ПА рост нитридных соединений в основном происходит с использованием небольших потоков активированного азота, т.е. с низкими скоростями роста $< 0.1 \mu\text{m/h}$. Этот факт, с одной стороны, свидетельствует о возможности прецизионного контроля толщин слоев на уровне 1–2 монослоев при МПЭ ПА синтезе квантоворазмерных гетероструктур на основе GaN, с другой стороны, низкие скорости роста значительно ограничивают возможность использования толстых буферных слоев, выращиваемых на подложках с целью снижения плотности дефектов в верхних слоях приборных эпитаксиальных гетероструктур. Вместе с тем, например, в работе [13] демонстрируется перспективность использования островковых ультратонких наоструктур GaN, выращенных непосредственно на кремниевых подложках методом МПЭ ПА для создания детекторов УФ излучения. В нашей работе мы синтезировали островковые наногетероструктуры AlGaN/AlN, которые в отличие от более популярных наноструктур с высоким аспектным соотношением, таких, как нановискеры, нанокolonки и т.д., имеют низкое аспектное соотношение. Они также были выращены без использования толстых эпитаксиальных буферных слоев для того, чтобы сделать процесс изготовления приборов на основе этих материалов, в первую очередь детекторов УФ излучения, максимального экономичным и быстрым. Таким образом, целью настоящей работы было исследование возможности эпитаксиального синтеза ультратонких эпитаксиальных гетероструктур AlGaN/AlN с приемлемым кристаллическим качеством на подложках кремния с различной модификацией поверхности (гладкая, пористая, с верхним слоем SiC) в едином ростовом процессе, т.е. в максимально близких ростовых условиях, и их всестороннее исследование.

Выполненный недавно нами цикл исследований по росту нанокolonчатых слоев GaN, синтезированных на гибридных подложках SiC/por-Si/c-Si [14,15] методом МПЭ ПА продемонстрировал перспективность данного подхода для интеграции технологии GaN с кремниевой электроникой и необходимость проведения дальнейших исследований в этом направлении. В связи с этим целью

настоящей работы является сравнительное исследование наноразмерных колончатых $Al_xGa_{1-x}N$ -гетероструктур, выращенных методом МПЭ ПА на подложках кремния с различными модификациями поверхности: стандартной, атомарно-гладкой c-Si, с переходным слоем пористого кремния por-Si/c-Si, а также гибридной подложке, содержащей слой карбида кремния, выращенного на поверхности кремния SiC/por-Si/c-Si.

1. Материалы и методы

Гетероструктуры $Al_xGa_{1-x}N/AlN$ выращивались методом молекулярно-пучковой эпитаксии с плазменной активацией азота (МПЭ ПА) на установке промышленного типа Veeco Gen 200 в едином эпитаксиальном процессе [16]. Перед ростом гетероструктур были проведены стандартные ростовые эксперименты по калибровке основных технологических параметров промышленной установки. Для контроля стабильности и калибровки эквивалентных давлений потоков алюминия (F_{Al}) и галлия (F_{Ga}) используется подвижный ионизационный датчик Байярда–Альперта с диапазоном измерений от 10^{-3} до 10^{-9} Torr, который в процессе измерений размещается перед главной заслонкой, т.е. практически в месте расположения подложки. С помощью ИК пирометра и W–Re термопары измерялись температуры всех типов используемых в экспериментах подложек (GaN/c- Al_2O_3 , c-Si, por-Si/c-Si, SiC/por-Si/c-Si). Следует отметить, что процедура калибровки основных технологических параметров используемой в работе установки МПЭ ПА Veeco Gen 200 осуществляется регулярно, чтобы исключить их неконтролируемое изменение и обеспечить устойчивую воспроизводимость результатов, которая подтверждалась при проведении калибровочных экспериментов по росту слоев AlN и GaN на виртуальных подложках GaN/c- Al_2O_3 . Особенности МПЭ ПА синтеза GaN на виртуальных подложках GaN/c- Al_2O_3 описаны в работе [17].

В частности, в калибровочных экспериментах по определению потоков F_{Al} , F_{Ga} и F_N в единицах скорости роста AlN и GaN использовались виртуальные подложки GaN/c- Al_2O_3 для минимизации рассогласования параметров кристаллических решеток растущих слоев AlN и GaN с подложкой. Для определения максимального потока активированного азота были проведены несколько технологических экспериментов по росту бинарных соединений AlN и GaN в металл-обогащенных условиях ($F_{III} > F_N$) при одинаковой температуре подложки ($T = 660^\circ\text{C}$), исключающей активную десорбцию атомов Ga и Al с ростовой поверхности. В каждом эксперименте выращивался слой AlN или GaN при постоянных значениях ВЧ мощности плазменного источника и расходах молекулярного азота. В проведенных экспериментах варьировались значения ВЧ мощности плазменного источника и расхода молекулярного азота. Толщины и соответственно скорости роста получен-

ных слоев определялись из *ex-situ* измерений растровой электронной микроскопии. Было обнаружено, что максимальное значение потока активированного азота, достижимое в имеющейся конфигурации установки, составляет $F_N \sim 0.04\text{--}0.05 \mu\text{m/h}$.

Аналогичный подход использовался для определения потоков F_{Al} и F_{Ga} в единицах скорости роста AlN или GaN. В этом случае рост слоев AlN или GaN на виртуальных подложках GaN/c-Al₂O₃ осуществлялся с использованием азот-обогащенных условий ($F_{III} < F_N$), контролируемых *in-situ* по трехмерной картине дифракции отраженных быстрых электронов.

Для роста исследуемых в работе гетероструктур Al_xGa_{1-x}N/AlN использовались подложки кремния Si(111) с различными модификациями поверхности: стандартные гладкие подложки c-Si, подложки Si(111) со сформированным на поверхности слоем пористого кремния por-c-Si, а также подложки SiC/por-Si/c-Si, на поверхностях которых с помощью метода согласованного замещения атомов был сформирован слой SiC [18].

Перед МПЭ ПА синтезом GaN подложки c-Si проходили подготовку по методу Шираки. Подложки por-Si и SiC/por-Si/c-Si обезжиривались. Затем все подложки загружались в один подложкодержатель установки МПЭ ПА, после чего отжигались в камере предварительного отжига при 200°C.

После этого подложки перемещались в основную ростовую камеру установки МПЭ ПА, где сначала проходили предэпитаксиальную подготовку, заключающуюся в нитридации поверхностей подложек в потоке активированного азота. Следует отметить, что в описываемых экспериментах процесс нитридации подложек проходил при закрытой заслонке источника азота, что по некоторым литературным данным может привести к формированию высококачественного слоя SiN на поверхности кремниевых подложек [19]. Следует также отметить, что подложки, содержащие слой SiC, не реагируют с азотом при данной температуре, поэтому они отжигались только для „чистоты“ эксперимента.

Процесс нитридации осуществлялся при температуре подложки, измеряемой ИК пирометром, $T \sim 670^\circ\text{C}$ в течение 30 min. Используя во время нитридации и для дальнейшего роста гетероструктур Al_xGa_{1-x}N/AlN параметры плазменного источника (ВЧ мощность и расход азота) соответствовали эквивалентной скорости роста GaN порядка 0.05 μm/h.

Эпитаксиальный синтез гетероструктур начинался с формирования на поверхностях подложек зародышевых слоев AlN при $T \sim 800^\circ\text{C}$, $F_{Al} \sim 0.02 \mu\text{m/h}$, выращиваемых в течение 60 min. После этого температура подложек опускалась до значения $T \sim 700^\circ\text{C}$ для роста основного слоя Al_xGa_{1-x}N, осуществлявшимся в течение 4 h при постоянных значениях $F_{Al} \sim 0.01 \mu\text{m/h}$, $F_{Ga} \sim 0.4 \mu\text{m/h}$ и $F_N \sim 0.04\text{--}0.05 \mu\text{m/h}$. Следует отметить, что в процессе роста наблюдалось постепенное увеличение температуры пирометра до $T \sim 707^\circ\text{C}$.

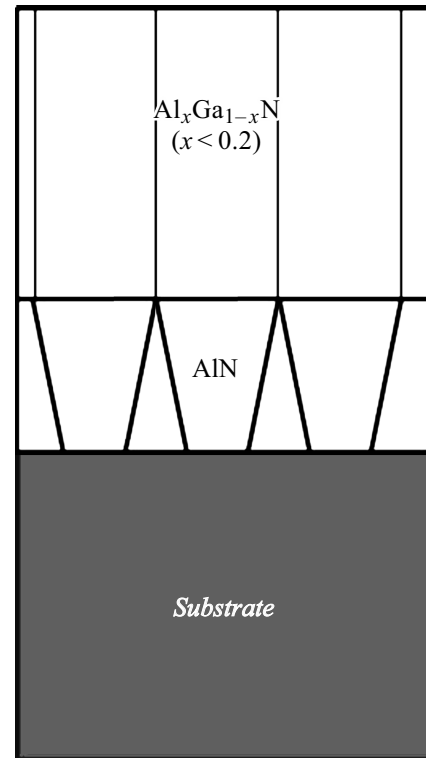


Рис. 1. Схематическое изображение исследуемых гетероструктур с разными типами подложек (c-Si, por-Si и SiC/por-Si/c-Si).

Структурные исследования образцов были выполнены с использованием высокоразрешающей рентгеновской дифракции на дифрактометре Bruker D8 Discover, работающего в режиме параллельного луча с линейной фокусировкой. Первичный пучок рентгеновского излучения медной трубки монохроматизирован с помощью Ge220 кристалла с двойным отражением.

Микроскопические исследования гетероинтерфейсов были выполнены на электронном микроскопе Libra 120 Carl Zeiss, а особенности морфологии поверхности исследовались с использованием сканирующего зондового микроскопа Femtoscan-001 NT MDT.

Данные о химическом состоянии поверхностных слоев были изучены методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS). Спектры регистрировались спектрометром SPECS (Германия). Возбуждение с использованием Mg K_α-излучением ($E = 1253.6 \text{ eV}$). Для удаления возможных загрязнений поверхностей образцов проводилось их облучение ионами Ar⁺ с энергией 4 keV и плотностью электронного тока $10 \mu\text{A/cm}^2$ при скорости удаления слоев $\sim 1 \text{ nm/min}$.

Оптические свойства образцов изучались в диапазоне 190–900 nm методом ультрафиолетовой (UV) спектроскопии с помощью прибора LAMBDA 650 фирмы Perkin Elmer, оснащенного универсальной приставкой URA, позволяющей получать спектры отражения в интервале углов падения от 8 до 80°.

Спектры люминесценции образцов были получены на установке измерения фотолюминесценции и оптического отражения Accent RPM Sigma. Исследования проводились при комнатной температуре при возбуждении лазером с длиной волны излучения 266 nm, $W = 5 \text{ W/cm}^2$.

2. Результаты и обсуждение

Микроструктура, а также морфология поверхности гетероструктур $Al_xGa_{1-x}N/AlN$, выращенных на разных типах подложек, была изучена с помощью сканирующей электронной (СЭМ) и атомно-силовой (АСМ) микроскопии соответственно.

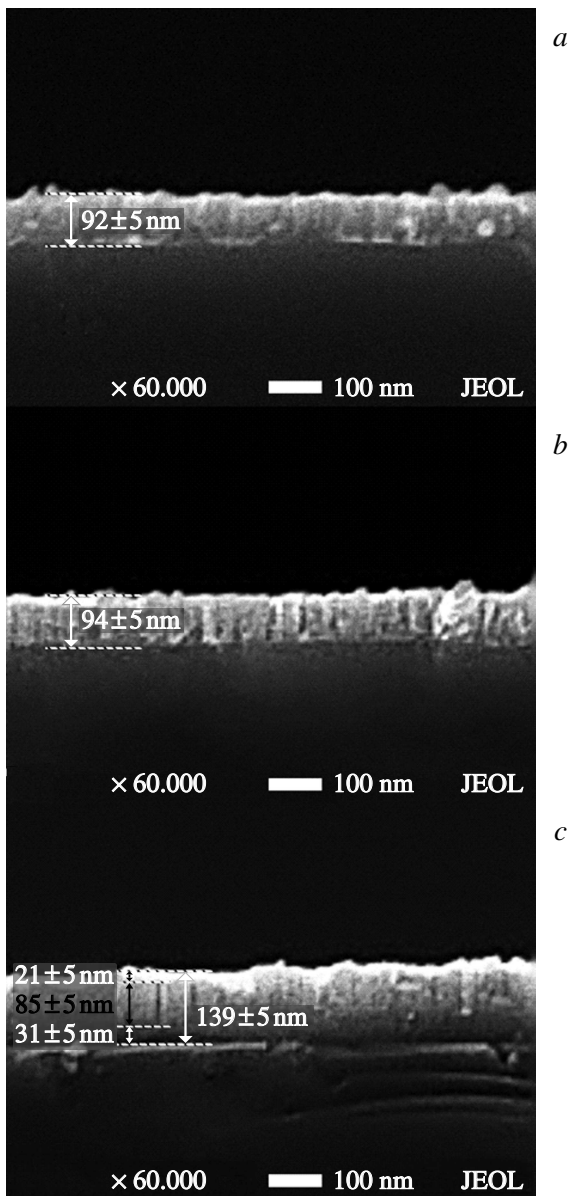


Рис. 2. СЭМ изображения сколов гетероструктур $Al_xGa_{1-x}N/AlN$, выращенных на различных подложках: *a* — *c*-Si; *b* — *por*-Si/*c*-Si; *c* — SiC/*por*-Si/*c*-Si.

На рис. 2 представлены изображения СЭМ сколов образцов. Из этих изображений следует, что все пленки имеют нанокolonчатую морфологию, их толщина различна, и зависит она от типа использованной подложки. Кроме того, было установлено, что толщина выращенных гетероструктур оказалась несколько меньше, чем это следовало из технологических условий роста. Так, на подложках *c*-Si и *por*-Si/*c*-Si общая толщина гетероструктуры $Al_xGa_{1-x}N/AlN$ составила ~ 92 и ~ 94 nm соответственно, в то время как на гибридной подложке SiC/*por*-Si/*c*-Si толщина гетероструктуры $Al_xGa_{1-x}N/AlN$ вместе со слоем SiC достигла ~ 140 nm: ~ 30 nm — сплошной слой SiC, ~ 106 nm — нанокolonчатая гетероструктура AlGaN/AlN.

Примечательно, что не только толщина слоев, но и морфология поверхности $Al_xGa_{1-x}N/AlN$ -гетероструктур оказалась зависимой от типа используемой подложки. Типичные изображения участков поверхности пленок представлены на рис. 3.

Анализ АСМ изображений показывает, что поверхность образца, выращенного на подложке *c*-Si, характеризуется гребенчатой структурой. В свою очередь, гребни обладают мелкозернистой структурой, размер зерен варьируется в широком диапазоне от нескольких десятков до ста нанометров. На поверхности наблюдаются кластеры диаметром от 100 до 200 nm, состоящие из более мелких глобул. Высота глобул составляет 50–60 nm. Поверхность образца *por*-Si/*c*-Si также имеет гребенчатую структуру. Гребни так же, как и в случае с образцом *c*-Si, обладают мелкозернистой структурой. На гребнях имеются кластеры куполообразной формы диаметром от 100 до 150 nm и высотой в среднем 55–60 nm.

Примечательно, что нанокolonки гетероструктуры, выращенной на гибридной подложке SiC/*por*-Si/*c*-Si, оказались наиболее плотно скомпонованы. Морфология поверхности этой гетероструктуры была наиболее гладкой, характеризовалась отсутствием гребней и кластеров и имела мелкозернистую структуру. Диаметр зерен, которые равномерно распределены по всей поверхности образца, находится в диапазоне от 30 до 60 nm.

Применение АСМ в полуконтактном режиме и использование специализированного программного обеспечения позволили оценить шероховатость поверхности гетероструктур. Эта величина принимает значение 5,4, 5,8 и 6,3 nm для образцов, выращенных на подложках *c*-Si, *por*-Si/*c*-Si и SiC/*por*-Si/*c*-Si соответственно. Таким образом, данные АСМ свидетельствуют о том, что в случае гетероструктуры $Al_xGa_{1-x}N/AlN$, выращенной на подложке SiC/*por*-Si/*c*-Si, на поверхности отсутствуют более крупномасштабные „глобулы“ и „кластеры“. Об этом также свидетельствуют профили сечений поверхности участков (рис. 3).

Причины наблюдаемых на СЭМ изображениях небольших различий в толщинах слоев гетероструктур $Al_xGa_{1-x}N/AlN$ мы обсудим ниже.

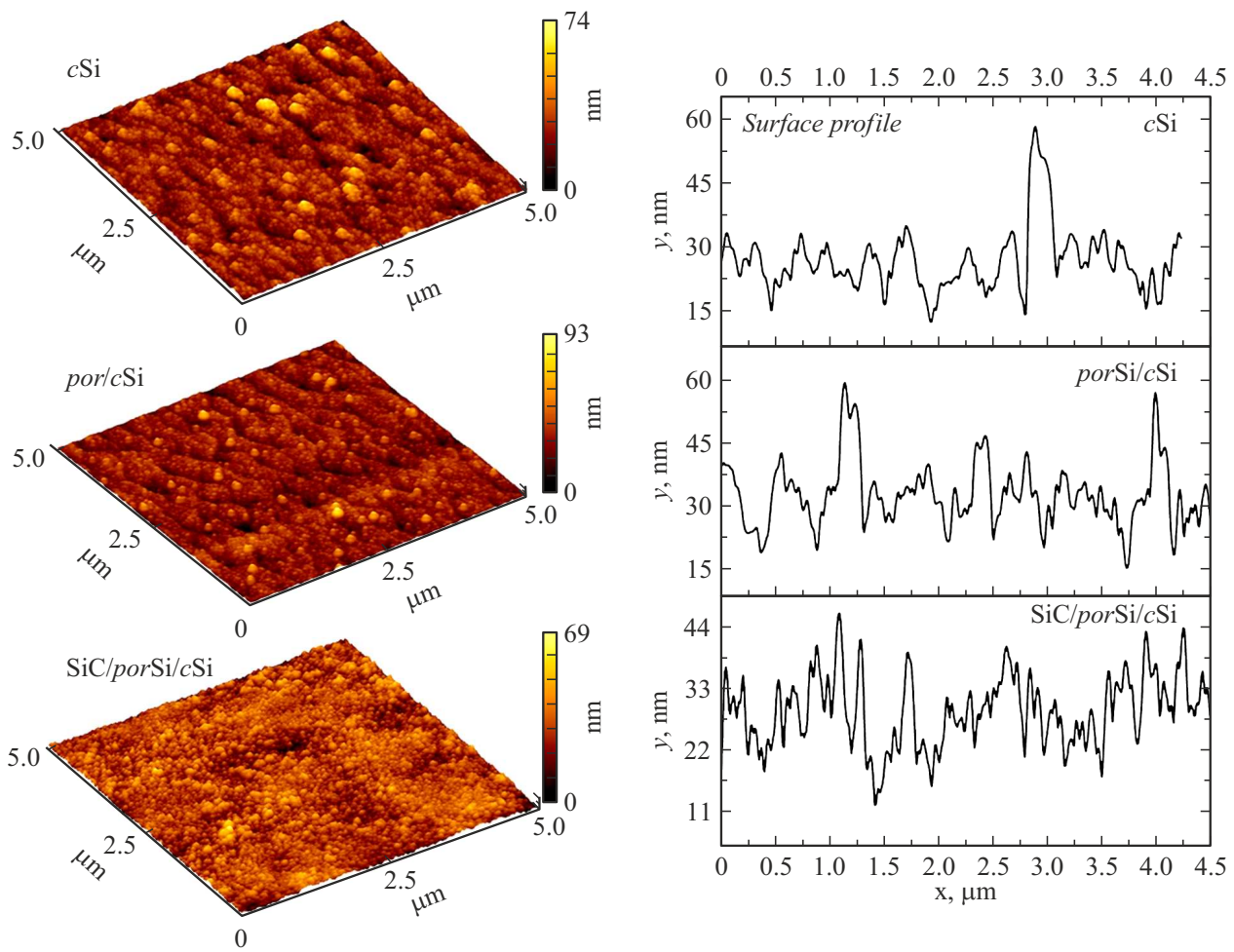


Рис. 3. Типичные АСМ изображения участков поверхности $5 \times 5 \mu\text{m}$ (слева) и профили сечения поверхности гетероструктур $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$, выращенных на трех типах подложек.

Из литературных данных известно, что термическая стойкость слоев $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ даже при относительно высоком содержании Al ($x \sim 0.5$) определяется менее прочной связью Ga–N. Как и в случае роста GaN, более высокая скорость разложения GaN, приводящая к высокой скорости десорбции адатомов Ga и N, наблюдается для металл-полярной поверхности слоев $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ при $T > 680^\circ\text{C}$. Разложение N-полярных слоев GaN происходит при более высоких температурах, а именно при $T > 750^\circ\text{C}$ [20]. Для подтверждения этих процессов нами были проведены исследования полярности выращенных гетероструктур. Согласно полученным результатам (рис. 2), до травления все образцы имели зернистую морфологию. После травления в KOH на поверхности наблюдались маленькие островки Al(Ga)N, которые образовывались в результате утонения областей, близких к основанию столбиков/зерен, что наблюдалось ранее в работах [21,22]. Формирования характерного пирамидообразного рельефа на верхних гранях зерен при этом не наблюдалось. Этот факт указывает на то, что эпитаксиальный рост в N-обогащенных условиях приводит

Таблица 1. Интегральные интенсивности связей N–Ga и N–Al и рассчитанные концентрации Ga и Al в твердом растворе $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

Образец	$C_{\text{Ga}}, \%$	$C_{\text{Al}}, \%$
c-Si	~ 94.1	~ 5.0
por-Si/c-Si	~ 93.1	~ 6.9
SiC/por-Si/c-Si	~ 81.5	~ 18.5

к формированию $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ -гетероструктур с Ga-полярной поверхностью.

Исследования химического состава поверхности твердого раствора $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ в гетероструктурах, выращенных на подложках c-Si, por-Si/c-Si и SiC/por-Si/c-Si, выполнены с использованием метода рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС, XPS). Проводя расчеты концентраций атомов Ga и Al в твердом растворе $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, мы исходили из соотношения интегральных интенсивностей связей N–Ga и N–Al по результатам

моделирования XPS спектров $N1s$ в программном продукте Casa XPS. Результаты представлены в табл. 1.

Из полученных результатов следует, что твердый раствор $Al_x Ga_{1-x} N$ с $x \sim 0.2 \sim F_{Al}/F_N$ сформировался только на гибридной подложке $SiC/por-Si/c-Si$, а на подложках $c-Si$ - и $por-Si/c-Si$ слой $Al_x Ga_{1-x} N$ слой не сформировался, обнаруживается только слой GaN с небольшой примесью AlN ($c \ x < 0.07$). Как видно из рис. 2, *a* и *b*, этот слой достаточно рыхлый и, как уже отмечалось выше, состоит из неплотно прилегающих друг к другу нанокколонок. Естественно, что механизмы роста $AlGaN$ на подложках $c-Si$ и $por-Si/c-Si$ отличаются от механизма роста $AlGaN$ на подложке $SiC/por-Si/c-Si$. Построение количественной модели требует отдельного рассмотрения, что будет сделано в дальнейшем. В настоящей работе мы попытаемся объяснить различие в механизмах образования $AlGaN$ на подложках $c-Si$, $por-Si/c-Si$ и $SiC/por-Si/c-Si$ пока лишь на качественном уровне. Прежде всего, отметим, что различие в параметрах решеток GaN и Si составляет 14.8%, а между AlN и Si это различие достигает 19%. Имеется различие и между линейными коэффициентами термического расширения решеток. Так, линейные коэффициенты термического расширения GaN и Si различаются на 33% при комнатной температуре. Слой $3C-SiC$ выполняет и роль компенсирующего буфера, уменьшая упругие напряжения в гетероэпитаксиальных слоях $III-N$. Покрытие кремния слоем $3C-SiC$ на Si позволяет преодолеть не только различие в параметрах решеток AlN и Si , но и различие в величинах термических линейных коэффициентов расширения (ТКЛР). Так, например, ТКЛР гексагонального GaN вдоль оси a , согласно базе данных ФТИ им. А.Ф. Иоффе [23], при температуре 700 К $\alpha^{GaN} \approx 4.9 \cdot 10^{-6} K^{-1}$, а при температуре 300 К этот коэффициент принимает значение $\alpha^{GaN} \approx 3.9 \cdot 10^{-6} K^{-1}$; для гексагонального AlN ТКЛР вдоль оси a при температуре 300 К $\alpha^{AlN} \approx 4.2 \cdot 10^{-6} K^{-1}$, а при температуре 700 К $\alpha^{AlN} \approx 5.9 \cdot 10^{-6} K^{-1}$. ТКЛР $3C-SiC$ при $T = 700$ К, согласно [24], приблизительно равен $4.4 \cdot 10^{-6} K^{-1}$, а при температуре 300 К ТКЛР $3C-SiC$, согласно [23], приблизительно равен $3.8 \cdot 10^{-6} K^{-1}$. У кремния ТКЛР равен $2.6 \cdot 10^{-6} K^{-1}$ [24] при температуре 300 К и порядка $3.8 \cdot 10^{-6} K^{-1}$ при $T = 700$ К. К этим данным нужно относиться с известной долей осторожности. Дело том, что объемные монокристаллы GaN — достаточно редкий материал, а объемные кристаллы $3C-SiC$ вообще практически не существуют, в отличие от гексагональных кристаллов SiC . Обычно образцы $3C-SiC$ являются тонкопленочными объектами на чужеродных подложках, поэтому точное определение ТКЛР — достаточно трудная задача. И все же из этих данных видно, что покрытие Si слоем $3C-SiC$ уменьшает различие в ТКЛР. Так, при комнатной температуре различие между ТКЛР Si и AlN порядка 38%, а различие ТКЛР между $3C-SiC$ и AlN порядка 9.5%. Отметим, что линейные коэффициенты термического расширения должны зависеть от структуры подложки, т.е. ТКЛР

должны быть различны для $c-Si$ и для $por-Si/c-Si$. Очевидно, что эти коэффициенты для $por-Si/c-Si$ будут зависеть и от плотности пор, и от их размеров. Этот вопрос, однако, требует отдельного исследования.

Теперь рассмотрим особенности строения пленок SiC , выращенных на Si методом согласованного замещения атомов. Согласно [25], в процессе превращения Si в SiC каждая пятая ячейка SiC практически когерентно сопрягается с каждой четвертой ячейкой Si . При этом остальные связи на межфазной границе между SiC и Si разорваны, и под слоем SiC в этих местах образуются поры. Расстояние между атомами C вдоль плоскости (111) в проекции на плоскость $(11\bar{2})$ в SiC равно 3.08 \AA [25]. Аналогичное расстояние между атомами Si в кремнии равно 3.84 \AA . Отсюда следует, что расстояние между плоскостями пяти ячеек в $SiC = 15.40 \text{ \AA}$, а расстояние между четырьмя ячейками $Si = 15.36 \text{ \AA}$. Следовательно, уже не пленка SiC обладает меньшим по отношению к исходной кремниевой подложке размером параметра решетки, а, наоборот, „новая“ подложка (четыре кремниевые ячейки с порами под их поверхностью) обладает меньшим в местах сопряжения параметром решетки. Таким образом, подложка в данном случае сжимает пленку SiC . Деформация, возникающая из-за различия между этими параметрами, незначительна и составляет 0.3%. Подобный эффект, как показано в [25,26], приводит к существенному изменению механизмов роста различных пленок на SiC/Si по сравнению с ростом пленок на Si . В процессе превращения Si в SiC между слоем SiC и Si , в Si образуется пористый слой, поры которого изнутри покрыты SiC . Собственно, это видно и на рис. 2, *c*. В нашем случае слой SiC был предварительно синтезирован на покрытой слое пор поверхности Si . Отметим, что в работе [27] были проведены исследования процессов роста SiC на пористом Si при различных режимах синтеза. При этом исследовался рост SiC методом замещения атомов на Si , покрытом ансамблем двух типов пор, а именно крупных диаметром ~ 500 nm и мелких диаметром ~ 17 nm. Результаты показали, что при синтезе SiC на Si , покрытых ансамблем мелких пор, а именно они нас и интересуют в данном случае, слой SiC вырос по своим структурным свойствам практически ни чем не отличающимся от слоя SiC , выращенного на непористом Si . Однако в то же время этот слой обладал весьма важным и отличительным свойством от слоя SiC , выращенного на непористом Si : его легко можно было отделить от поверхности Si , т.е. этот слой имеет лишь незначительный контакт с Si . В этой же работе ([27]) было показано, что наличие пористого буферного слоя SiC приводит к значительному снижению механических напряжений, вызванных различием в ТКЛР.

На основании этих данных можно сделать следующие выводы относительно того, почему обнаруживается столь разительное отличие в структуре слоев $AlGaN$, выращенных на подложках $c-Si$, $por-Si/c-Si$ и $SiC/por-Si/c-Si$. На подложке $c-Si$ при осаждении

AlGaN возникают большие упругие напряжения, вызванные как большим различием в параметрах решеток этих веществ, так и большим различием в их ТКЛР. Это приводит к изменению равновесных концентраций адатомов Al, Ga и N, из которых по реакции типа $x\text{Al} + (1-x)\text{Ga} = \text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ образуются зародыши AlGaN. Как известно, скорость стационарной нуклеации зародышей новой фазы определяется больцмановским распределением $I = K \exp(-\Delta F^*/kT)$ [28], где ΔF^* — свободная энергия образования зародыша критического размера, K — предэкспоненциальный множитель, зависящий от кинетических параметров роста зародыша. Согласно [28], свободная энергия образования AlN, GaN и AlGaN, ΔF^* зависит от констант равновесия химических реакций образования этих веществ, протекающих на поверхности подложек. Под воздействием упругой энергии будут изменяться как равновесные концентрации адатомов Al, Ga и N, так и работа образования самих зародышей. В результате скорость реакции образования AlGaN может быть меньше скорости реакции образования нитрида алюминия $\text{Al} + \text{N} = \text{AlN}$ или скорости реакции образования чистого $\text{Ga} + \text{N} = \text{GaN}$. В результате будет и меньше скорость их нуклеации. Именно поэтому, по нашему мнению, и не образуется AlGaN на подложке *c*-Si. Подложка *por*-Si/*c*-Si в этом смысле более предпочтительна. Как мы уже обсуждали выше, поры приводят к релаксации термических напряжений. Очевидно, что при этом хоть и незначительно, но все же возрастает вероятность протекания реакции образования AlGaN, что, в конечном счете, приводит к повышению вероятности его нуклеации. Однако наличие пор может приводить к тому, что упругие напряжения как термические, так и вызванные различием в параметрах решеток, будут распределены неравномерно по всей поверхности подложки. Над порами эти напряжения могут сводиться к нулю, а на свободной от пор поверхности они будут достигать больших значений. Это приведет к неравномерному образованию слоя AlGaN как по составу, так и по структуре. Если принять во внимание, что внутренняя часть пор может быть заполнена различными газами и, особенно, парами воды, которые очень трудно десорбируются даже при высокой температуре, то AlGaN и на этой подложке пластически не будет расти, поскольку в этом случае пары воды будут препятствовать зарождению эпитаксиальной структуры.

На поверхности подложки SiC/*por*-Si/*c*-Si слой пор закрыт слоем SiC, параметры решеток SiC и AlGaN различаются незначительно. Близки, как мы показали выше, и коэффициенты ТКЛР. В работе [27] на примере роста GaN на подложке SiC/*por*-Si были проведены численные расчеты. Они показали, что наличие пор под слоем SiC приводит к периодической модуляции механических напряжений, которая полностью отсутствует у пленок SiC, лежащих непосредственно на Si без пор. Расчеты также показали, что непосредственно в зоне соприкосновения буферного слоя и пленки GaN

механические напряжения могут достигать значительных величин, однако они очень быстро спадают при увеличении толщины пленки. Оказалось, что увеличение глубины пор ведет к уменьшению упругих термических напряжений. Таким образом, наличие подобной системы пор помогает значительно снизить механические напряжения на поверхности тонкой пленки, возникающие вследствие различий в ТКЛР.

Таким образом, наши экспериментальные исследования однозначно показали, что большое различие в параметрах решеток подложка–пленка приводят не только к возникновению различного рода дефектов, но и существенно воздействуют на химию образования твердых растворов, в данном случае на химию образования AlGaN, и для преодоления этой негативной тенденции можно использовать подложки SiC, выращенные на пористом Si.

Для исследования фазового состава и кристаллической структуры образцов были выполнены рентгеновские $\omega/2\theta$ сканирования, которые представлены на рис. 4. Анализ показывает, что основным и наиболее высокоинтенсивным является дифракционное отражение, которое принадлежит (111) плоскости монокристаллической кремниевой подложки. Кроме того, на $\omega/2\theta$ дифрактограммах образцов, содержащих слой *por*-Si, появляется запрещенный для Si низкоинтенсивный рефлекс (333), что, по-видимому, является следствием нарушения симметрии кристаллической решетки в пористом слое.

Что же касается дифракции от эпитаксиальной пленки $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$, то ее интенсивность на 3–4 порядка ниже, чем от подложки Si, и указывает на малую толщину эпитаксиального слоя. Согласно эксперименту, на дифрактограммах всех гетероструктур $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ наблюдаются максимумы около 36.05, 37.9, 66.11 и 76.5°, которые принадлежат отражениям от плоскостей (0002), (10 $\bar{1}$ 1), (10 $\bar{1}$ 3) и (0004) вюрцитного AlN. Наиболее интенсивными в этом наборе являются рефлексы 0002 и 0004, что указывает на тот факт, что столбики AlN преимущественно выращены вдоль направления (0001) во всех трех образцах. Однако присутствие на дифрактограммах дополнительных низкоинтенсивных отражений (10 $\bar{1}$ 1) и (10 $\bar{1}$ 3) указывает как на разориентацию нанокколонок AlN относительно направления роста, заданного (111) ориентацией подложки Si, так и на вероятное зарастание нанокколонок AlN в направлении $\langle 10\bar{1}1 \rangle$ и $\langle 10\bar{1}3 \rangle$, что коррелирует с уже продемонстрированными нами результатами для ультратонких нанокколонок GaN [15].

Следует отметить, что только на дифрактограмме образца, выращенного на подложке SiC/*por*-Si/*c*-Si, наблюдается рефлекс около 35.8°, который может быть строго приписан (0002) отражению от твердого раствора $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Кроме того, на $\omega/2\theta$ дифрактограмме образца SiC/*por*-Si/*c*-Si присутствует дифракционный максимум, относимый к кубическому полимиту SiC-3C, поскольку, как показано в работе [27], вне зависимости

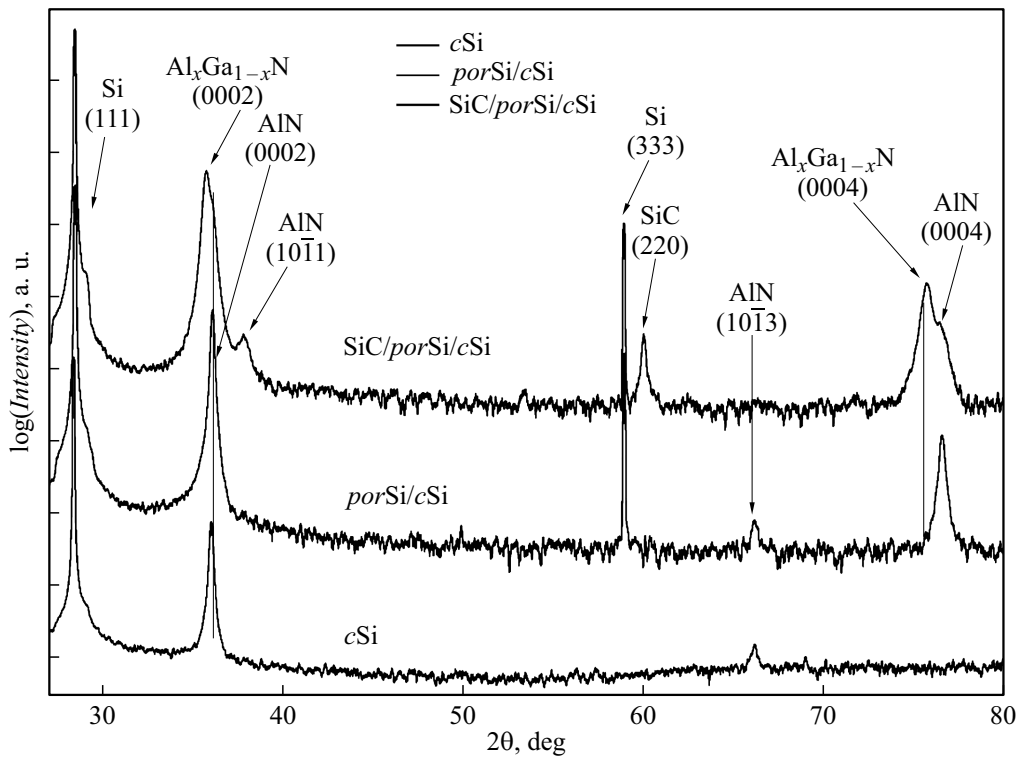


Рис. 4. Рентгеновские $\omega/2\theta$ дифракции для образцов гетероструктур $Al_xGa_{1-x}N/AiN$, выращенных на различных подложках.

от ориентации Si, обработки Si или формирования в Si пор, вследствие особенностей механизма согласованного замещения атомов [11] на поверхности Si всегда формируются грани (111) SiC. На границе пор и поверхности (111) Si грани (111) SiC могут быть наклонены или развернуты по отношению к грани (111) Si.

Необходимо отметить, что отсутствие отражений от $Al_xGa_{1-x}N$ на дифрактограммах образцов *c*-Si и *por*-Si/*c*-Si является следствием различной эффективности встраивания атомов Ga при эпитаксиальном синтезе твердых растворов AlGaN на наноклончатом буферном слое AiN, выращенном на подложках кремния без слоя SiC и с этим слоем. Наблюдаемые на СЭМ изображения различия в толщинах слоев гетероструктур $Al_xGa_{1-x}N/AiN$ являются подтверждением образования Ga-обогащенных кластеров, в кристаллической структуре которых отсутствует дальний порядок, что, вероятнее всего, и приводит к размытию дифракционных рефлексов AlGaN для структур *c*-Si и *por*-Si/*c*-Si.

На основе данных рентгеновской дифракции были рассчитаны параметры решетки для эпитаксиального слоя AiN и твердого раствора $Al_xGa_{1-x}N$ в рамках подхода, описанного в работе [15]. В соответствии с анизотропной теорией упругости для эпитаксиальных слоев с вюрцитной решеткой определена плоскостная деформация ϵ_{xx} (вдоль оси *a*) и внеплоскостная деформация ϵ_{zz} (вдоль оси *c*), а также биаксиальные напряжения в плоскости роста (the in-plane biaxial stress) σ_{xx} [29]. При этом предполагалось, что для расчета параметров кри-

сталлической решетки, а также коэффициентов упругой деформации $C(x)_{ij}$ для твердых растворов, справедливо использование закона Пуассона–Вегарда [30–34].

Рассчитанные величины постоянных кристаллической решетки, компоненты деформации в плоскости ϵ_{xx} и в направлении роста ϵ_{zz} , а также напряжения в плоскости роста σ_{xx} для эпитаксиальных слоев исследованных образцов представлены в табл. 2.

Из полученных результатов видно, что деформации в слоях AiN и $Al_xGa_{1-x}N$ имеют разный знак. В плоскости роста они являются растягивающими, в то время как в направлении роста являются сжимающими. Это происходит из-за несоответствия параметров кристаллических решеток подложки и эпитаксиальных слоев AiN и $Al_xGa_{1-x}N$. Следует отметить, что наименьший уровень остаточных напряжений σ_{xx} для слоя AiN наблюдается в образце, сформированном на гибридной подложке SiC/*por*-Si/*c*-Si. Однако при этом в слое твердого раствора $Al_xGa_{1-x}N$ гетероструктуры, выращенной на подложке SiC/*por*-Si/*c*-Si, уровень остаточных напряжений σ_{xx} на порядок превышает тот, который наблюдается для подслоя AiN.

Кристаллическое качество выращенных $Al_xGa_{1-x}N/AiN$ гетероструктур было охарактеризовано измерениями рентгеновских кривых качания. ω -дифракционные кривые около узла (0002) AiN представлены на рис. 5.

Предварительный анализ ω -кривых качания (рис. 5) показал, что профиль кривой для гетероструктуры, вы-

Таблица 2. Результаты рентгеновской дифрактометрии

Образец	Слой	c-параметр решетки, Å	a-параметр решетки, Å	Напряжение в c-направлении, ϵ_{zz}	Напряжение в a-направлении, ϵ_{xx}	Двухосное напряжение в плоскости σ_{xx} , GPa
SiC/por-Si/c-Si	AlGaN	5.1144	3.21237	-0.0054	0.0110	5.27
	AlN	4.9784	3.111937	$-2.25 \cdot 10^{-4}$	$4.17 \cdot 10^{-4}$	0.20
por-Si/c-Si	AlGaN	-	-	-	-	-
	AlN	4.9735	3.1179	-0.0011	0.0023	1.12
c-Si	AlGaN	-	-	-	-	-
	AlN	4.9728	3.1187	-0.0013	0.0026	1.27

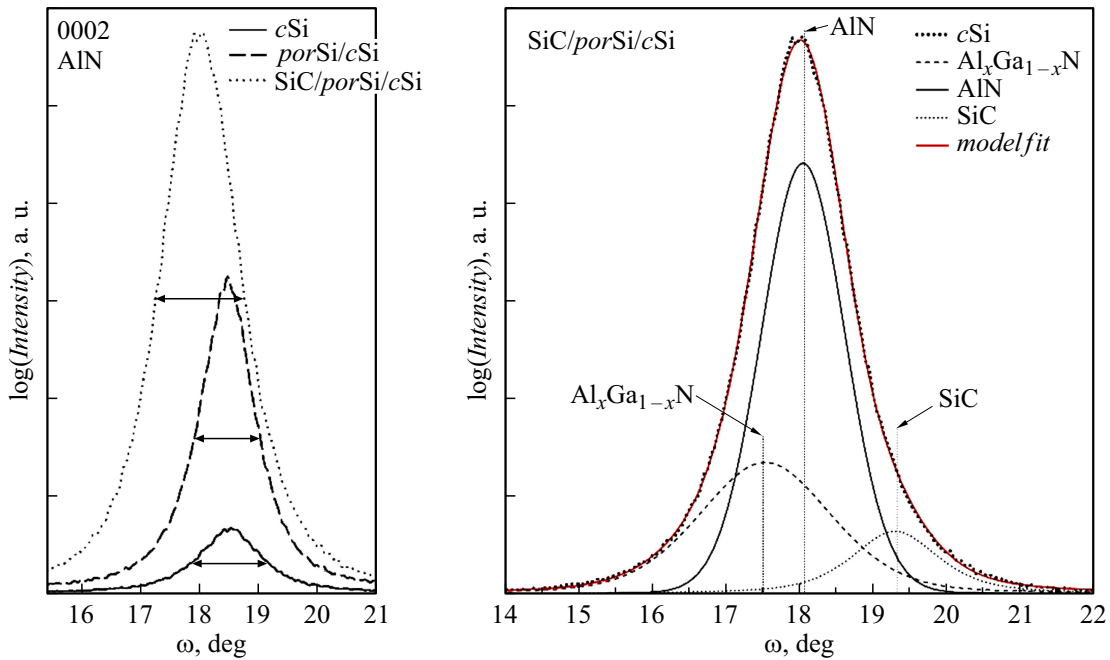


Рис. 5. Рентгеновские ω -кривые качания около плоскости 0002 AlN для образцов c-Si, por-Si/c-Si и SiC/por-Si/c-Si (слева). Деконволюция кривой качания около плоскости 0002 AlN для образца SiC/por-Si/c-Si (справа).

ращенной на подложке SiC/por-Si/c-Si, имеет заметную асимметрию. С учетом данных $\omega/2\theta$ -сканирования, этот факт связан с наложением рефлексов от различных слоев гетероструктуры. Для определения вкладов каждого максимума выполнена деконволюция профиля на компоненты (рис. 5, справа). Моделирование выполнено в программе Origin 8. Определение числа экстремумов выполнялось с использованием второй производной. Хорошо видно, что форма профиля обусловлена наложением линии от слоя AlN и твердого раствора $Al_xGa_{1-x}N$, а также низкоинтенсивного максимума, расположенного при больших углах дифракции. Этот рефлекс принадлежит кубическому 3C-SiC, решетка которого имеет тетрагональные искажения из-за рассогласований параметров кристаллической решетки.

Поскольку угловая ширина рефлекса на ω -кривой качания коррелирует с мозаичностью (углом разворота)

кристаллитов друг относительно друга, угловой диапазон разориентации кристаллитов в эпитаксиальной пленке может быть оценен как разница ширины кривой качания слоя ω_{RC}^f и инструментальной ширины ω_{RC}^i . За инструментальную ширину $\omega_{RC}^i = 0.014^\circ$ принята ширина 004 рефлекса эталона кремния NIST SRM, измеренная в аналогичных условиях.

Результаты показывают, что мозаичность η для слоя AlN принимает величину ± 0.62 , ± 0.55 и $\pm 0.67^\circ$ для образцов, выращенных на подложках c-Si, SiC/c-Si и SiC/por-Si/c-Si. Хорошо видно, что меньшая дисперсия мозаичности характерна для наноклончатой эпитаксиальной структуры, выращенной на подложке por-Si/c-Si, что уже наблюдалось нами ранее, но для толстых слоев [14,35]. В то же время величина мозаичности для нанокристаллов твердого раствора $Al_xGa_{1-x}N$, выращенных на SiC/por-Si/c-Si, составляет ± 1.02 . Увеличение

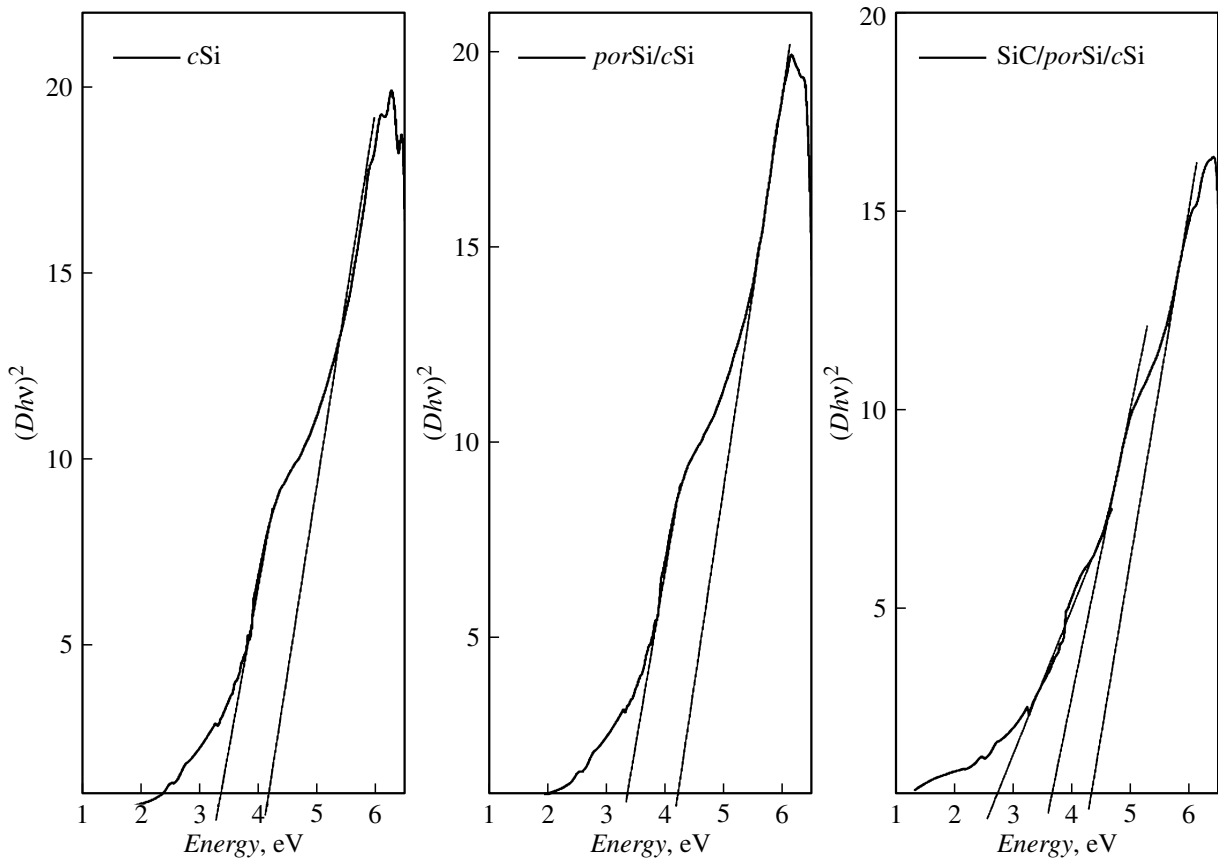


Рис. 6. Графический анализ методом Тауца зависимостей $(D \cdot hv)^2$ от энергии оптического излучения для гетероструктур $Al_xGa_{1-x}N/AlN$, выращенных на подложках *c*-Si (слева), *por*-Si/*c*-Si (центр) и SiC/*por*-Si/*c*-Si (справа).

FWHM рентгеновской кривой ω -качания объясняется наклоном нанокколонок, вызванным релаксацией напряжений несоответствия параметров решеток эписюля и подложкой.

Оптические свойства $Al_xGa_{1-x}N/AlN$ гетероструктур в области UV длин волн были изучены на основе отработанной нами в ряде работ методике [36]. Для этого в области 1–6 eV были получены спектры пропускания–отражения, из которых рассчитана оптическая плотность D . После этого построены зависимости $(D \cdot hv)^2$ от hv и выполнен их графический анализ методом Тауца [37,38]. В результате найдены участки с линейной зависимостью $(D \cdot hv)^2$, указывающие на наличие в этой спектральной области прямых разрешенных переходов, энергии которых сопоставлены нами с известными литературными данными для аналогичных образцов.

Из полученных результатов (рис. 6) следует, что для всех исследуемых образцов характерно возникновение двух прямых переходов с энергиями в диапазонах 3.2–3.6 eV и 4.1–4.4 eV. В то же время для гетероструктуры, выращенной на подложке SiC/*por*-Si/*c*-Si методом Тауца, обнаружен еще один переход в области меньших энергий ~ 2.5 eV (рис. 6, справа).

Наблюдаемый высокоэнергетический переход может быть приписан к прямому разрешенному межзонному переходу типа зона–зона в точке Γ зоны Бриллюэна в вюрцитном AlN и совпадающему с энергетической шириной его запрещенной зоны.

Несмотря на тот факт, что в большом числе литературных источников указано, что ширина запрещенной зоны AlN $E_g \sim 6$ eV, ранее неоднократно демонстрировалось явление сужения ширины запрещенной зоны до значения $E_g \sim 4.1$ eV в пленках нитрида алюминия, выращенных при пониженных значениях температур подложки [39]. Известны также работы, в которых демонстрировалось значение $E_g \sim 5.1$ eV для пленок AlN, выращенных на подложках Si(100) при различных температурах подложки: от комнатной температуры (RT) до 500°C [40]. Сужение запрещенной зоны AlN до значения $E_g \sim 4.6$ eV также наблюдалось в пленках высокотекстурированного нитрида алюминия [41]. Второй обнаруженный во всех структурах переход около 3.2–3.6 eV, вероятно, связан с высокой плотностью дефектов в материале, которые формируют уровни в запрещенной зоне и хвосты плотности состояний в валентной зоне и зоне проводимости.

Что касается прямого перехода ~ 2.5 eV, обнаруженного в образце, выращенном на подложке SiC/*por*-

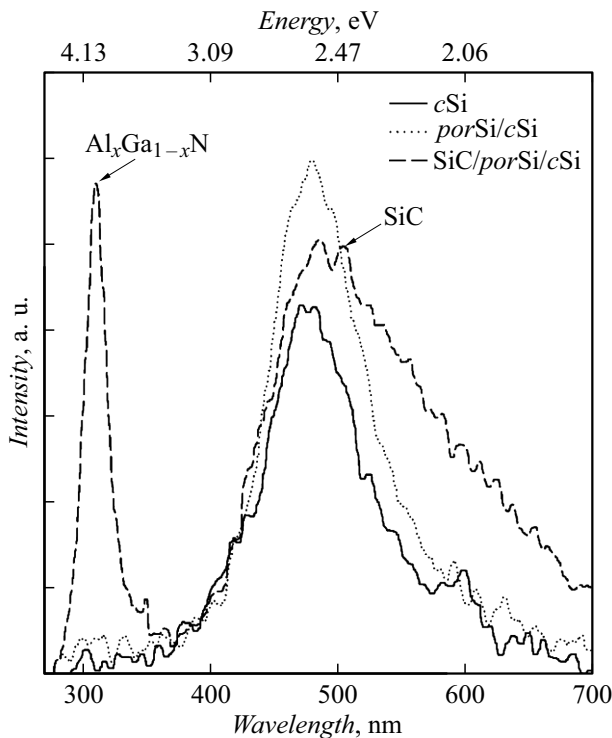


Рис. 7. Спектры PL при $T \sim 300^\circ\text{C}$ от гетероструктур $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$, выращенных на подложках $c\text{-Si}$, $\text{por-Si}/c\text{-Si}$ и $\text{SiC}/\text{por-Si}/c\text{-Si}$.

$\text{Si}/c\text{-Si}$, то эта полоса поглощения хорошо совпадает с энергией запрещенной зоны кубического политапа карбида кремния 3C-SiC E_g ($\Gamma 15v-X1c$) ~ 2.41 eV [42]. При этом в работе [43] отмечено, что возникающие в тонких слоях деформации могут вызывать достаточно большой (до 0.5 eV) сдвиг величины оптической ширины запрещенной зоны. Учитывая тот факт, что ошибка использованного нами метода изучения оптических свойств составляет $\sim 0.1-0.2$ eV, обнаруженные экспериментально в области 3.95–4.15 eV прямые переходы вполне вероятно могут быть соотнесены с оптическим поглощением от $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

Следует отметить, что экспериментально обнаруженные сдвиги энергий прямых переходов для GaN коррелируют со значением двухосного напряжения в плоскости σ_{xx} , рассчитанного на основе данных рентгеновской дифрактометрии.

На рис. 7 показаны спектры фотолюминесценции эпитаксиальных гетероструктур $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ для всех исследуемых образцов. Хорошо видно, что люминесценция образцов в области 300–900 nm зависит от типа использованной для роста подложки.

Исследования показывают, что высокоэнергетический пик с энергией максимума $E_g = 3.99$ eV, т.е. в УФ области спектра вблизи 310 nm, присутствует только в спектре ФЛ гетероструктуры $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$, выращенной на подложке $\text{SiC}/\text{por-Si}/c\text{-Si}$. Кроме того, в спектрах всех исследованных образцов можно наблюдать

широкую дополнительную желтую полосу, которую, как правило, связывают с наличием глубоких дефектов в слоях Al_xN [44].

Заметим, что в спектре ФЛ образца, выращенного на гибридной подложке $\text{SiC}/\text{por-Si}/c\text{-Si}$, присутствует пик с максимумом около 2.34 eV. Этот пик может быть приписан подслою 3C-SiC , для которого ширина запрещенной зоны составляет $E_g \sim 2.24-2.39$ eV [45,46], что также коррелирует с нашими результатами, полученными методом UV.

Известно, что величина оптической ширины запрещенной зоны может быть использована для оценки состава твердого раствора $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ [47].

Согласно закону Вегарда в твердом растворе $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ зависимость энергии запрещенной зоны от содержания Al имеет нелинейный характер:

$$E_g^{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}(x) = E_g^{\text{GaN}}(1-x) + E_g^{\text{AlN}}x - bx(1-x), \quad (1)$$

где b — параметр изгиба ($\sim 1.0 \pm 0.3$ для комнатной температуры), $E_g^{\text{GaN}} = 3.45$ eV, $E_g^{\text{AlN}} = 6.13$ eV. Однако, как было показано в работе [48], при $x \leq 0.25$ последним членом в (1) можно пренебречь, и зависимость является линейной.

С учетом этих допущений для гетероструктуры, выращенной на подложке $\text{SiC}/\text{por-Si}/c\text{-Si}$, был определен состав твердого раствора $\text{Al}_{0.20}\text{Ga}_{0.80}\text{N}$, что находится в прекрасном согласии с результатами фотоэлектронной микроскопии. Тот факт, что мы не наблюдаем УФ PL от образцов, выращенных на подложках $\text{por-Si}/c\text{-Si}$ и $c\text{-Si}$, также коррелирует с результатами рентгеновской дифракции, свидетельствующими об отсутствии в этих образцах сформированного твердого раствора $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$.

3. Обсуждение результатов

Объединив в работе методы структурной, микроскопической и спектроскопической диагностики, мы провели сравнительные исследования наноразмерных колончатых $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ гетероструктур, синтезированных на подложках $c\text{-Si}$, $\text{por-Si}/c\text{-Si}$, и $\text{SiC}/\text{por-Si}/c\text{-Si}$ методом МПЭ ПА.

Как следует из экспериментальных данных, состав, толщина и морфология осажденной пленки, а также содержание алюминия в твердом растворе $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ зависят от типа используемых в настоящей работе подложек. Слой $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ с составом $x \sim 0.20$ сформировался только на гибридной подложке $\text{SiC}/\text{por-Si}/c\text{-Si}$, в то время как на подложках $c\text{-Si}$ и $\text{por-Si}/c\text{-Si}$ слой AlGaN не сформировался. Установлено, что эпитаксиальный рост гетероструктур $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ в N-обогащенных условиях привел к формированию слоев $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ с Ga-полярной поверхностью.

Анализ данных микроскопии также подтверждает формирование слоя с наноклончатой морфологией, при этом латеральный размер зерен (наноклонок) варьируется в широком диапазоне от нескольких десятков

до ста нанометров. Сформировавшиеся наноклонки $Al_xGa_{1-x}N$ имеют наклон относительно c -оси, который, по-видимому, вызван релаксацией упругих напряжений несоответствия параметров решеток эписля и подложки.

Что касается оптических свойств образцов $Al_xGa_{1-x}N/AlN$ гетероструктур в области 1–6 eV, то оптическое поглощение/люминесценция образцов также зависит от типа использованной для роста подложки. Показано, что только в спектре ФЛ гетероструктуры $Al_xGa_{1-x}N/AlN$, выращенной на подложке SiC/por-Si/c-Si, наблюдается высокоэнергетический пик с энергией $E_g = 3.99$ eV, соответствующей величине запрещенной зоны твердого раствора $Al_xGa_{1-x}N$ ($x \sim 0.2$). При этом в спектрах всех исследуемых образцов наблюдается желтая полоса фотолуминесценции, которую, как правило, связывают наличием глубоких дефектов в слоях $Al_{III}N$ [49].

Таким образом, исследования показали, что при использовании одних и тех же условий МПЭ ПА гетероструктура $Al_xGa_{1-x}N(x \sim 0.2)/AlN$ с наноклончатой морфологией удовлетворительно растет на гибридной подложке SiC/por-Si/c-Si, а на подложках c -Si и por-Si/c-Si слой $Al_xGa_{1-x}N$ с меньшим $x < 0.07$ находится лишь в стадии неупорядоченного твердого раствора.

Полученные результаты однозначно свидетельствуют о различных механизмах роста пленок $Al_xGa_{1-x}N$ на наноклончатом буферном слое AlN, выращенном на подложках кремния без слоя SiC и с этим слоем. Присутствие в составе темплейта слоя SiC, выращенного на пористом Si, эффективно влияет на механизмы роста пленок и на его адсорбционные характеристики, увеличивая скорость нуклеации упорядоченного твердого раствора $Al_xGa_{1-x}N$ заданного состава и, как следствие, влияет на структурное и оптические качества $Al_{III}N$ структур.

Результаты, представленные в настоящей работе, демонстрируют перспективность использования подложек SiC/por-Si/c-Si для интеграции кремниевой технологии и технологии синтеза наноразмерных колончатых гетероструктур $Al_xGa_{1-x}N$ методом молекулярно-пучковой эпитаксии с плазменной активацией азота.

Финансирование работы

А.С. Леньшин выполнил микроскопические исследования и получил данные о химическом состоянии слоев при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда 19-72-10007.

П.В. Середин, Д.Л. Голощапов и Д.Н. Нестеров выполнили структурно-спектроскопические исследования при поддержке гранта Министерство науки и высшего образования РФ (грант № FZGU-2023-0006).

С.А. Кукушкин синтезировал подложку SiC/Si и провел теоретический анализ процесса роста слоев AlGaN в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ в ФГПУ ИПМаш РАН.

Контракт № FFNF-2021-000, тема № 121112500383-9.

А.М. Мизеров, М.С. Соболев, С.Н. Тимошнев и К.Ю. Шубина осуществляли рост структур AlGaN методом МПЭ ПА и проводили исследования их полярности в рамках Государственного задания № FSRM-2023-0006.

В части доступа к научному оборудованию и методологии данное исследование выполнено при поддержке Минобрнауки России по договору № 075-15-2021-1351.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] G. Dewey, M.K. Hudait, Kangho Lee, R. Pillarisetty, W. Rachmady, M. Radosavljevic, T. Rakshit, R. Chau. IEEE Electron Device Lett., **29**, 1094 (2008). DOI: 10.1109/LED.2008.2002945
- [2] D. Kohen, X.S. Nguyen, S. Yadav, A. Kumar, R.I. Made, C. Heidelberger, X. Gong, K.H. Lee, K.E.K. Lee, Y.C. Yeo, S.F. Yoon, E.A. Fitzgerald. AIP Adv., **6**, 085106 (2016). DOI: 10.1063/1.4961025
- [3] J.A. Del Alamo, D.A. Antoniadis, J. Lin, W. Lu, A. Vardi, X. Zhao. IEEE J. Electron. Dev. Soc., **4**, 205 (2016). DOI: 10.1109/JEDS.2016.2571666
- [4] J.A. del Alamo. Nature, **479**, 317 (2011). DOI: 10.1038/nature10677
- [5] H. Riel, L.-E. Wernersson, M. Hong, J.A. del Alamo. MRS Bull., **39**, 668 (2014). DOI: 10.1557/mrs.2014.137
- [6] Z. Wang, A. Abbasi, U. Dave, A. De Groote, S. Kumari, B. Kunert, C. Merckling, M. Pantouvaki, Y. Shi, B. Tian, K. Van Gasse, J. Verbist, R. Wang, W. Xie, J. Zhang, Y. Zhu, J. Bauwelinck, X. Yin, Z. Hens, J. Van Campenhout, B. Kuyken, R. Baets, G. Morthier, D. Van Thourhout, G. Roelkens. Laser Photon. Rev., **11**, 1700063 (2017). DOI: 10.1002/lpor.201700063
- [7] H.-C. Wang, T.-Y. Tang, C.C. Yang, T. Malinauskas, K. Jarasiunas. Thin Solid Films, **519**, 863 (2010). DOI: 10.1016/j.tsf.2010.08.149
- [8] J. Lu, X. Zheng, M. Guidry, D. Denninghoff, E. Ahmadi, S. Lal, S. Keller, S.P. DenBaars, U.K. Mishra. Appl. Phys. Lett., **104**, 092107 (2014). DOI: 10.1063/1.4867508
- [9] S. Keller, N.A. Fichtenbaum, M. Furukawa, J.S. Speck, S.P. DenBaars, U.K. Mishra. Appl. Phys. Lett., **90**, 191908 (2007). DOI: 10.1063/1.2738381
- [10] A.M. Mizerov, S.A. Kukushkin, Sh.Sh. Sharofidinov, A.V. Osipov, S.N. Timoshnev, K.Yu. Shubina, T.N. Berezovskaya, D.V. Mokhov, A.D. Buravlev. Phys. Solid State, **61**, 2277 (2019). DOI: 10.1134/S106378341912031X
- [11] Y. Wu, X. Liu, A. Pandey, P. Zhou, W.J. Dong, P. Wang, J. Min, P. Deotare, M. Kira, E. Kioupakis, Z. Mi. Prog. Quantum Electron., **85**, 100401 (2022). DOI: 10.1016/j.pquantelec.2022.100401
- [12] A.M. Mizerov, P.N. Kladko, E.V. Nikitina, A.Yu. Egorov. Semiconductors, **49**, 274 (2015). DOI: 10.1134/S1063782615020177
- [13] L. Goswami, R. Pandey, G. Gupta. Appl. Surf. Sci., **449**, 186 (2018). DOI: 10.1016/j.apsusc.2018.01.287

- [14] P.V. Seredin, H. Leiste, A.S. Lenshin, A.M. Mizerov. *Appl. Surf. Sci.*, **508**, 145267 (2020). DOI: 10.1016/j.apsusc.2020.145267
- [15] P.V. Seredin, D. Goloshchapov, A.O. Radam, A.S. Lenshin, N.S. Builov, A.M. Mizerov, I.A. Kasatkin. *Opt. Mater.*, **128**, 112346 (2022). DOI: 10.1016/j.optmat.2022.112346
- [16] A.M. Mizerov, S.N. Timoshnev, M.S. Sobolev, E.V. Nikitina, K.Yu. Shubina, T.N. Berezovskaia, I.V. Shtrom, A.D. Bouravleuv. *Semiconductors*, **52**, 1529 (2018). DOI: 10.1134/S1063782618120175
- [17] A.M. Mizerov, S.N. Timoshnev, E.V. Nikitina, M.S. Sobolev, K.Yu. Shubin, T.N. Berezovskaia, D.V. Mokhov, W.V. Lundin, A.E. Nikolaev, A.D. Bouravleuv. *Semiconductors*, **53**, 1187 (2019). DOI: 10.1134/S1063782619090112
- [18] S.A. Kukushkin, A.V. Osipov, N.A. Feoktistov. *Phys. Solid State*, **56**, 1507 (2014). DOI: 10.1134/S1063783414080137
- [19] N. Yamabe, H. Shimomura, T. Shimamura, T. Ohachi. *J. Cryst. Growth*, **311**, 3049 (2009). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2009.01.076
- [20] A.M. Mizerov, V.N. Jmerik, P.S. Kop'ev, S.V. Ivanov. *Phys. Status Solidi C*, **7**, 2046 (2010). DOI: 10.1002/pssc.200983488
- [21] K.Y. Shubina, D.V. Mokhov, T.N. Berezovskaya, E.V. Nikitina, A.M. Mizerov. *J. Phys. Conf. Ser.*, **1851**, 012004 (2021). DOI: 10.1088/1742-6596/1851/1/012004
- [22] K.Y. Shubina, D.V. Mokhov, T.N. Berezovskaya, E.V. Pirogov, A.V. Nashchekin, S.S. Sharofidinov, A.M. Mizerov. *J. Phys. Conf. Ser.*, **2086**, 012037 (2021). DOI: 10.1088/1742-6596/2086/1/012037
- [23] <https://www.ioffe.ru/SVA/>
- [24] S. Kukushkin, A. Osipov, V. Bessolov, B. Medvedev, V. Nevolin, K. Tcarik. *Rev. Adv. Mater. Sci.*, **17**, 1 (2008)
- [25] S.A. Kukushkin, A.V. Osipov. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **47**, 313001 (2014). DOI: 10.1088/0022-3727/47/31/313001
- [26] S.A. Kukushkin, A.V. Osipov. *Конденсированные среды и межфазные границы*, **24**, 406 (2022). DOI: 10.17308/kcmf.2022.24/10549
- [27] V.V. Kidalov, S.A. Kukushkin, A. Osipov, A. Redkov, A.S. Grashchenko, I.P. Soshnikov. *Mater. Phys. Mech.*, **36**, 39 (2018). DOI: 10.18720/MPM.3612018_4
- [28] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов, В.Н. Бессолов, Е.В. Коненкова, В.Н. Пантелеев. *ФТТ*, **59**, 660 (2017). DOI: 10.21883/FTT.2017.04.44266.287
- [29] V.S. Harutyunyan, A.P. Aivazyan, E.R. Weber, Y. Kim, Y. Park, S.G. Subramanya. *J. Phys. Appl. Phys.*, **34**, A35 (2001). DOI: 10.1088/0022-3727/34/10A/308
- [30] H.-P. Lee, J. Perozek, L.D. Rosario, C. Bayram. *Sci. Rep.*, **6**, 37588 (2016). DOI: 10.1038/srep37588
- [31] S.K. Jana, P. Mukhopadhyay, S. Ghosh, S. Kabi, A. Bag, R. Kumar, D. Biswas. *J. Appl. Phys.*, **115**, 174507 (2014). DOI: 10.1063/1.4875382
- [32] P.V. Seredin, A.V. Glotov, E.P. Domashevskaya, I.N. Arsenyev, D.A. Vinokurov, I.S. Tarasov. *Appl. Surf. Sci.*, **267**, 181 (2013). DOI: 10.1016/j.apsusc.2012.09.053
- [33] П.В. Середин, А.В. Глотов, В.Е. Терновская, Э.П. Домашевская, И.Н. Арсентьев, Л.С. Вавилова, И.С. Тарасов. *ФТП*, **45**(11), 1489 (2011). [P.V. Seredin, A.V. Glotov, V.E. Ternovaya, E.P. Domashevskaya, I.N. Arsenyev, L.S. Vavilova, I.S. Tarasov. *Semiconductors*, **45**(11), 1433 (2011). DOI: 10.1134/S1063782611110236]
- [34] П.В. Середин, А.В. Глотов, В.Е. Терновская, Э.П. Домашевская, И.Н. Арсентьев, Д.А. Винокуров, А.Л. Станкевич, И.С. Тарасов. *ФТП*, **45**(4), 488 (2011). [P.V. Seredin, A.V. Glotov, V.E. Ternovaya, E.P. Domashevskaya, I.N. Arsenyev, D.A. Vinokurov, A.L. Stankevich, I.S. Tarasov. *Semiconductors*, **45**(4), 481 (2011). DOI: 10.1134/S106378261104021X]
- [35] P.V. Seredin, H. Leiste, A.S. Lenshin, A.M. Mizerov. *Results Phys.*, **16**, 102919 (2020). DOI: 10.1016/j.rinp.2019.102919
- [36] P.V. Seredin, A.S. Lenshin, D.S. Zolotukhin, I.N. Arsenyev, D.N. Nikolaev, A.V. Zhabotinskiy. *Phys. B Condens. Matter.*, **530**, 30 (2018). DOI: 10.1016/j.physb.2017.11.028
- [37] Tauc J. *Prog. Semicond. Heywood Lond.*, **9**, 87 (1965).
- [38] P.V. Seredin, A.S. Lenshin, A.M. Mizerov, H. Leiste, M. Rinke. *Appl. Surf. Sci.*, **476**, 1049 (2019). DOI: 10.1016/j.apsusc.2019.01.239
- [39] S. Bakalova, A. Szekeres, M. Anastasescu, M. Gartner, L. Duta, G. Socol, C. Ristoscu, I.N. Mihailescu. *J. Phys. Conf. Ser.*, **514**, 012001 (2014). DOI: 10.1088/1742-6596/514/1/012001
- [40] N. Sharma, S. Sharma, K. Prabakar, S. Amirthapandian, S. Ilango, S. Dash, A.K. Tyagi. (2015). DOI: 10.48550/ARXIV.1507.04867
- [41] A.M. Alsaad, Q.M. Al-Bataineh, I.A. Qattan, A.A. Ahmad, A. Ababneh, Z. Albataineh, I.A. Aljarrah, A. Telfah. *Front. Phys.*, **8**, 115 (2020). DOI: 10.3389/fphy.2020.00115
- [42] K.M. Lee, J.Y. Hwang, B. Urban, A. Singh, A. Neogi, S.K. Lee, T.Y. Choi. *Solid State Commun.*, **204**, 16 (2015). DOI: 10.1016/j.ssc.2014.11.020
- [43] W. Shan, J.W. Ager, K.M. Yu, W. Walukiewicz, E.E. Haller, M.C. Martin, W.R. McKinney, W. Yang. *J. Appl. Phys.*, **85**, 8505 (1999). DOI: 10.1063/1.370696
- [44] E. Serban, J. Palisaitis, M. Junaid, L. Tengdelius, H. Högberg, L. Hultman, P. Persson, J. Birch, Ch.-L. Hsiao. *Energies*, **10**, 1322 (2017). DOI: 10.3390/en10091322
- [45] G.L. Zhao, D. Bagayoko. *New J. Phys.*, **2**, 16 (2000). DOI: 10.1088/1367-2630/2/1/316
- [46] A. Arvanitopoulos, N. Lophitis, S. Perkins, K.N. Gyftakis, M. Belanche Guadas, M. Antoniou. In: *2017 IEEE 11th Int. Symp. Diagn. Electr. Mach. Power Electron. Drives SDEMPED* (IEEE, Tinos, Greece, 2017), p. 565–571. DOI: 10.1109/DEMPED.2017.8062411
- [47] N. Aggarwal, S. Krishna, L. Goswami, S.K. Jain, A. Pandey, A. Gundimeda, P. Vashishtha, J. Singh, S. Singh, G. Gupta. *SN Appl. Sci.*, **3**, 291 (2021). DOI: 10.1007/s42452-021-04274-4
- [48] H. Angerer, D. Brunner, F. Freudenberg, O. Ambacher, M. Stutzmann, R. Höppler, T. Metzger, E. Born, G. Dollinger, A. Bergmaier, S. Karsch, H.-J. Körner. *Appl. Phys. Lett.*, **71**, 1504 (1997). DOI: 10.1063/1.119949
- [49] Y. Turkulets, N. Shauloff, O.H. Chaulker, Y. Shapira, R. Jelinek, I. Shalish. *Surf. Interfaces*, **38**, 102834 (2023). DOI: 10.1016/j.surfin.2023.102834