

Компенсированный высокоомный буфер для GaN-HEMT

Т.В. Малин¹, Д.С. Милахин¹, И.А. Александров¹, В.Е. Земляков³, Д.Ю. Протасов¹, А.С. Кожухов¹, Б.Я. Бер⁴, В.Г. Мансуров¹, К.С. Журавлёв^{1,2}

¹Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН

²Новосибирский государственный университет

³Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

⁴Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе

Аннотация: в данной работе продемонстрирована возможность получения методом аммиачной молекулярно-лучевой эпитаксией намеренно нелегированных высокоомных буферных слоёв GaN в AlGaN/GaN гетероструктурах с высокой подвижностью электронов для транзисторов путём оптимизации ростовых условий на основании расчётов концентраций фоновых примесей и точечных дефектов для различных соотношений потоков галлия и аммиака.

Ключевые слова: GaN, собственные точечные дефекты, фоновые примеси, AlGaN/GaN, HEMT, NH₃-МВЕ

1. Введение

Одной из наиболее важных задач при росте гетероструктур для транзисторов с высокой подвижностью электронов (HEMT) на основе соединений A₃-N является получение буферного слоя GaN с высокими значениями пробивного напряжения. Как известно, слои GaN зачастую имеют n-тип проводимости из-за непреднамеренного легирования слоёв в процессе роста кислородом из остаточной атмосферы ростовой камеры [1]. Существует два подхода к решению данной задачи. Первый заключается в преднамеренной компенсации доноров акцепторами (углеродом или железом) [2, 3]. Второй, наиболее часто реализуемый в технологии газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений (МОСГФЭ), основан на преднамеренном снижении структурного совершенства начальных буферных слоёв GaN, в результате которого происходит увеличение количества краевых дислокаций в слоях GaN, что приводит к возрастанию числа глубоких акцепторных уровней [4], на которые происходит захват электронов с донорных уровней. При легировании буферных слоёв GaN железом наблюдается «эффект памяти» [5], что может приводить к непреднамеренному легированию всех слоёв гетероструктуры. Целенаправленное снижение структурного совершенства буферных слоёв GaN является противоречивым способом решения проблемы, поскольку повышение плотности дислокаций неизбежно ведет к ухудшению электрофизических параметров двумерного электронного газа. В работе [3] сообщается о технической возможности использования в технологии МОСГФЭ пропана для легирования слоёв GaN углеродом, однако авторы работы установили негативное влияние пропана на структурное совершенство слоёв на начальных этапах роста. В ряде работ сообщается о возможности управлять фоновым легированием углеродом [6] и кислородом [7] путём изменения ростовых условий.

В данной работе продемонстрирована возможность получения методом аммиачной молекулярно-лучевой эпитаксией (NH₃-МВЕ) намеренно нелегированных высокоомных слоёв GaN для HEMT путём оптимизации ростовых условий на основании расчётов концентраций фоновых примесей для различных соотношений потоков галлия и аммиака.

2. DFT расчёты

Для определения влияния условий роста на вероятность формирования точечных дефектов в GaN были проведены расчеты их энергий формирования и концентраций в зависимости от условий роста слоев. Расчеты проводились методами теории функционала плотности в приближении обобщенного градиента с использованием функционала PBE [8] в пакете программ Quantum Espresso 6.3 [9, 10]. Для расчетов использовались оптимизированные сохраняющие норму псевдопотенциалы Вандербита (ONCVSP v0.4) [11]. Энергии формирования дефектов в различных зарядовых состояниях рассчитывались с использованием 96-атомной сверхъячейки и сетки $2 \times 2 \times 2$ при интегрировании по зоне Бриллюэна. Для учета искусственного влияния зарядов соседних сверхъячеек при расчете полной энергии заряженных дефектов использовалась корректировка, предложенная в работе [12]. Для учета недооценки ширины запрещенной зоны в приближении обобщенного градиента использована предложенная в работе [13] корректировка края валентной зоны GaN для функционала PBE. Энергии формирования дефектов рассчитывались следующим образом [14]:

$$E_{form}^{def}(q) = E_{tot}^{def}(q) - E_{tot}^{GaN} - \sum_i n_i \mu_i + q(E_F + E_V), \quad (1)$$

где $E_{form}^{def}(q)$ – энергия формирования дефекта в зарядовом состоянии q , $E_{tot}^{def}(q)$ – полная энергия сверхъячейки с дефектом, E_{tot}^{GaN} – полная энергия сверхъячейки бездефектного GaN, n_i – количество атомов i -го элемента добавленных ($n_i > 0$) или удаленных ($n_i < 0$) из сверхъячейки с дефектом, μ_i – химический потенциал соответствующего элемента. E_V – край валентной зоны GaN, E_F – уровень Ферми, отсчитанный от края валентной зоны GaN. Химические потенциалы элементов зависят от ростовых условий. Граничные значения химических потенциалов определяются формированием соответствующих конкурирующих фаз, например, для Ga-обогащенных условий роста химический потенциал галлия равен полной энергии атома Ga в металлическом Ga, для N-обогащенных химический потенциал азота равен полной энергии атома N в молекуле N_2 . Для примесей углерода и кислорода соответствующими конкурирующими фазами являются углерод в фазе графита или алмаза и Ga_2O_3 . Концентрации дефектов рассчитывались в предположении, что условия роста близки к термодинамическому равновесию:

$$c = N_{sites} N_{config} \exp\left(-\frac{E_{form}}{kT}\right), \quad (2)$$

где N_{sites} – количество возможных положений дефекта в решетке на единицу объема, N_{config} – количество возможных конфигураций дефекта. Положение уровня Ферми рассчитывалось из условия зарядовой нейтральности. Расчеты энергий формирования проводились для собственных точечных дефектов и примесей кислорода и углерода, как основных фоновых примесей для данной методики роста. При расчете концентраций учитывалось несколько типов дефектов, имеющих наименьшие энергии формирования: собственные вакансии V_{Ga} , V_N , примеси замещения C_N , O_N , и комплексы $V_{Ga}O_N$, $V_{Ga}2O_N$, $V_{Ga}3O_N$, $C_N O_N$.

На рис. 1а показаны расчетные зависимости уровня Ферми от химического потенциала галлия при различных химических потенциалах фоновых примесей кислорода и углерода. Основной донорной примесью является O_N . В N-обогащенных условиях основным компенсирующим центром является $V_{Ga}2O_N$. При увеличении отношения потока Ga к потоку NH_3 концентрация вакансионно-кислородных комплексов уменьшается, а концентрация O_N растет, что приводит к смещению уровня Ферми ближе к зоне проводимости, однако при этом растет также и концентрация C_N . Энергия формирования C_N имеет более сильную зависимость от соотношения потоков

Ga и NH_3 , и, начиная с некоторого соотношения потоков, определяемого соотношением фоновых потоков кислорода и углерода, уровень Ферми начинает смещаться дальше от зоны проводимости с ростом отношения потока Ga к потоку NH_3 из-за компенсации доноров O_N акцепторами C_N . При этом также растут и общие концентрации примесей кислорода и углерода (рис. 1b). Общие концентрации примесей увеличиваются также с увеличением температуры роста.

Согласно полученным в ходе расчётов данным (рис. 1a,b) существуют ростовые условия, при которых выращиваемые слои GaN могут обладать высоким сопротивлением и при этом достаточно низкой концентрацией дефектов.

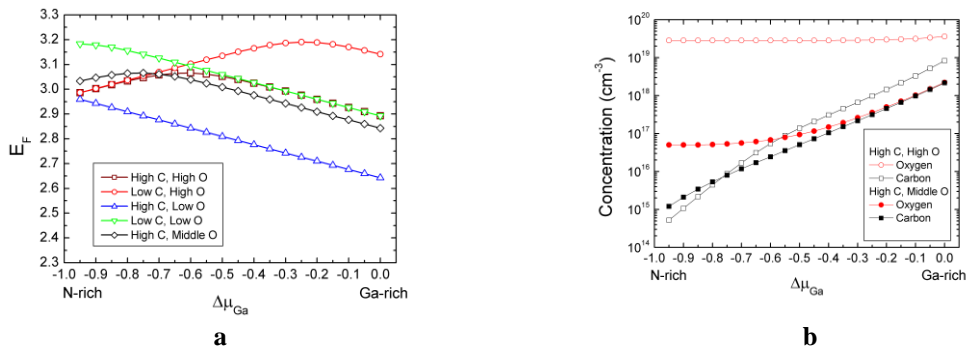


Рисунок 1. а. Расчёт положения уровня Ферми в GaN в зависимости от химического потенциала галлия для различных уровней легирования GaN фоновыми примесями кислорода и углерода при температуре роста $800\text{ }^\circ\text{C}$. Показан расчет для предельных химических потенциалов кислорода и углерода, для химического потенциала кислорода на 0.1 eV и на 0.5 eV ниже предельного, и для химического потенциала углерода на 0.5 eV ниже предельного. **б.** Расчётные зависимости общей концентрации фоновых примесей кислорода и углерода как функция химического потенциала галлия при температуре роста $800\text{ }^\circ\text{C}$.

3. Рост и электрофизические параметры гетероструктур

Эпитаксиальные слои GaN и AlGaIn/GaN гетероструктуры (ГЭС) с двумерным электронным газом (2DEG) выращивались на подложке сапфира методом NH_3 -MBE на установке CBE Riber 32. В качестве источника активного азота использовался поток очищенного аммиака, источниками металлов служили стандартные эффузионные ячейки. Перед ростом подложка подвергалась высокотемпературному отжигу ($900\text{ }^\circ\text{C}$) в вакууме в течение одного часа. Затем подложка нитридовалась в потоке аммиака 25 sccm в течении 10 min при температуре $840\text{ }^\circ\text{C}$, данные условия нитридации способствуют согласованию сапфировой подложки с последующими слоями ГЭС и в дальнейшем приводят к росту AlN металлической полярности. Подробно влияние нитридации на морфологию и структурное совершенство буферных слоёв AlN исследовано в работе [16]. Далее выращивался буферный слой AlN металлической полярности толщиной 300 nm , растился слой GaN толщиной 1000 nm , далее на гетерогранице формировался двумерный электронный газ. Конструкция ГЭС представлена в таблице 1.

Таблица 1. Конструкция гетероструктуры с 2DEG на подложке сапфира

Слой	Толщина
«Сар»-слой GaN	$2,0\text{ nm}$
Барьерный слой $\text{Al}_{x=0,27}\text{GaN:Si}$ n-тип	$15,0\text{ nm}$
Барьерный слой i- $\text{Al}_{x=0,27}\text{GaN}$	$10,0\text{ nm}$
Модификатор КЯ AlN	$1,0\text{ nm}$
Активный слой GaN	1000 nm
Буферный слой AlN	300 nm
Подложка Al_2O_3	$430\text{ }\mu\text{m}$

Для реализации стехиометрических условий, способствующих формированию слоёв GaN с высоким сопротивлением, была выбрана температура роста 800 °C при потоке аммиака 200 ссст. Столь низкая температура роста, согласно литературным данным, позволяет снизить вхождение кислорода в GaN в процессе роста [7], что приводит к формированию самокомпенсированного материала и одновременно является достаточной для обеспечения гладкой морфологии поверхности слоёв GaN со среднеквадратичной шероховатостью $rms = 2 \text{ nm}$ (см. рис. 2).

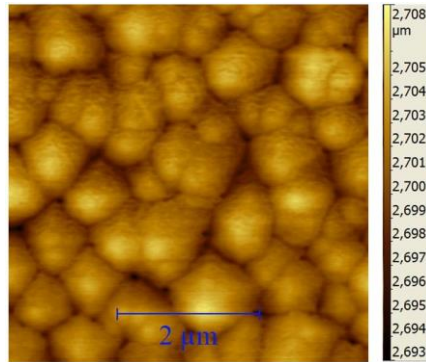


Рисунок 2. Изображение поверхности слоя GaN полученные с помощью атомно-силового микроскопа размером $5 \times 5 \mu\text{m}^2$, Z-шкала 15 nm, $rms=2 \text{ nm}$.

Исследование буферных слоёв GaN методом вторичной ионной масс спектрометрии (ВИМС) позволило установить характерные уровни легирования фоновыми примесями кислородом $N_O=1.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ и углеродом $N_C=2.4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (см. рис. 3).

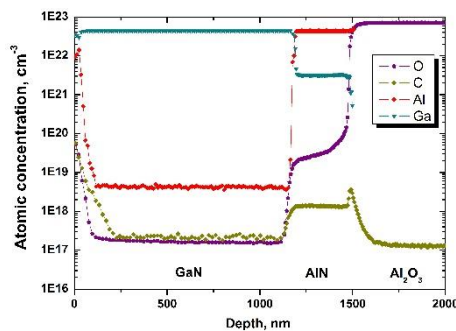


Рисунок 3. Профили ВИМС AlGaN/GaN ГЭС с 2DEG.

Сопоставление результатов расчётов концентраций углерода и кислорода в слое GaN с результатами профилей ВИМС позволяет оценить концентрацию свободных электронов в слое GaN $8.0 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$, что соответствует сопротивлению $2.1 \times 10^{11} \text{ Ohm}/\square$.

4. ВАХ транзисторов

Для изготовления тестовых транзисторов использовалась ГЭС с буферным слоем GaN, выращенным согласно выбранным ростовым условиям. Концентрация $n=1,0E+13 \text{ cm}^{-2}$ и подвижность $\mu=1650 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ электронов в ГЭС была измерена с помощью эффекта Холла. Полевые транзисторы формировались методом оптической литографии с затвором Шоттки длиной $0.25 \mu\text{m}$ и омическими контактами на основе металлизации Ti/Al/Ni/Au. ВАХ транзисторов с шириной затвора $90 \mu\text{m}$ приведены на рис. 4а. Удельная крутизна транзистора составила $250 \text{ mS}/\text{mm}$. Измеренный ток утечки закрытого транзистора при подаче запирающего напряжения -5 V и напряжении сток-исток $U_{си} = 135 \text{ V}$ составил $\sim 220 \mu\text{A}$ (см. рис. 4б), что с одной стороны открывает возможность работы транзистора при напряжении на стоке до 70 V с другой стороны резко повышает надежность при работе на стандартном для СВЧ-применений напряжении 28 V .



Рисунок 4. а. ВАХ тестового транзистора. **б.** Измерение тока утечки закрытого транзистора.

5. Заключение

Представлены результаты разработки МЛЭ технологии AlGaIn/GaN гетероструктур с намеренно нелегированным высокоомным буферным слоем GaN. На выращенной ГЭС сформированы полевые СВЧ транзисторы. Продемонстрирован малый ток утечки $\sim 220 \mu\text{A}$ при подаче запирающего напряжения -5 V и напряжении сток-исток $U_{\text{СИ}} = 135 \text{ V}$. Столь малое значение тока утечки при высоком значении тянущего напряжения было достигнуто за счёт самокомпенсации фоновых примесей и точечных дефектов в выбранных на основании DFT расчётов стехиометрических условиях.

Работа выполнена в рамках государственного задания 0306-2019-00008 «Гетероструктуры на основе материалов A_3B_5 для СВЧ электроники и СВЧ фотоэлектроники». ВИС измерения проводились на оборудовании федерального ЦКП «Материаловедение и диагностика в передовых технологиях», поддержанного Минобрнауки России (Уникальный идентификатор проекта RFMEFI62117X0018).

Список литературы

1. Marian Caliebe, Parasitic Background Doping in Semipolar GaN / Marian Caliebe and Ferdinand Scholz // Annual Report 2016, Institute of Optoelectronics, Ulm University. — 2016. — P. 23-28.
2. Z. Bougrioua, Fe doping for making resistive GaN layers with low dislocation density; consequence on HEMTs / Z. Bougrioua, [at al.] // Phys. stat. sol. (c). — 2005. — Vol. 2. — No. 7. — P. 2424–2428.
3. В.В. Лундин, Полуизолирующие эпитаксиальные слои GaN:C, полученные методом газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений с использованием пропана как источника углерода / В.В. Лундин, [и др.] // Письма в ЖТФ. — 2016. — Т. 42. — № 10. — С. 85–91.
4. Nils G. Weimann, Scattering of electrons at threading dislocations in GaN / Nils G. Weimann, [at al.] // J. Appl. Phys.). — 1998. — Vol. 83. — No. 7. — P. 3656–3659.
5. Rudzinski M., Growth of Fe doped semi-insulating GaN on sapphire and 4H-SiC by MOCVD / Rudzinski M., [at al.] // Phys. stat. sol. (c). — 2006. — Vol. 3. — No. 6. — P. 2231 - 2236.
6. Piero Gamarra, Optimisation of a carbon doped buffer layer for AlGaIn/GaN HEMT devices / Piero Gamarra, [at al.] // J. Cryst. Growth. — 2015. — Vol. 414. — P. 232-236.
7. Felix Schubert, Growth condition dependence of unintentional oxygen incorporation in epitaxial GaN / Felix Schubert, [at al.] // Science and Technology of Advanced Materials — 2016. — Vol. 17. — P. 239–243.
8. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof // Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996).
9. P. Giannozzi et al. // J. Phys.:Condens. Matter 21 395502 (2009).
10. P. Giannozzi et al. // J. Phys.:Condens. Matter 29 465901 (2017).
11. D. R. Hamann // Phys. Rev. B 88, 085117 (2013).
12. C. Freysoldt, J. Neugebauer, and C. G. Van de Walle // Phys. Rev. Lett. 102, 016402 (2009).
13. J.L. Lyons, C.G. Van de Walle // NPJ Comp. mater. 3, 12 (2017).
14. C.G. Van de Walle and J. Neugebauer // J. Appl. Phys. 95, 3851 (2004).
15. Т.В. Малин, Влияние степени нитридации сапфира и обогащения алюминием зародышевого слоя на структурные свойства слоев AlN / Т.В. Малин, [и др.] // ФТП — 2018. — Т. 52. — № 6. — С. 643–650.