

# Компенсированный высокоомный буфер для GaN-HEMT

Т.В. Малин<sup>1</sup>, Д.С. Милахин<sup>1</sup>, И.А. Александров<sup>1</sup>, В.Е. Земляков<sup>3</sup>, Д.Ю. Протасов<sup>1</sup>, А.С. Кожухов<sup>1</sup>, Б.Я. Бер<sup>4</sup>, В.Г. Мансуров<sup>1</sup>, К.С. Журавлёв<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН

<sup>2</sup>Новосибирский государственный университет

<sup>3</sup>Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

<sup>4</sup>Физико-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, NH<sub>3</sub>-МВЕ

## 1. Введение

Одной из наиболее важных задач при росте гетероструктур для транзисторов с высокой подвижностью электронов (HEMT) на основе соединений A<sub>3</sub>-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 (NH<sub>3</sub>-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,  $\mu_i$  – 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:

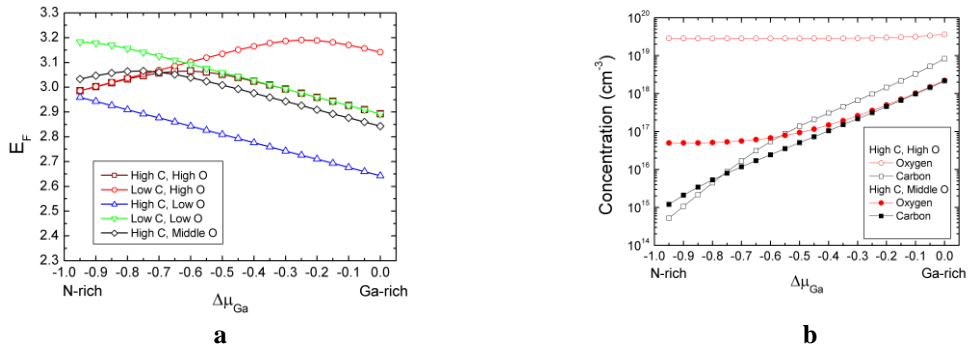
$$c = N_{sites} N_{config} \exp\left(-\frac{E_{form}}{kT}\right), \quad (2)$$

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<sub>3</sub>, 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<sub>3</sub> из-за компенсации доноров O<sub>N</sub> акцепторами C<sub>N</sub>. 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 °С. 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 °С.

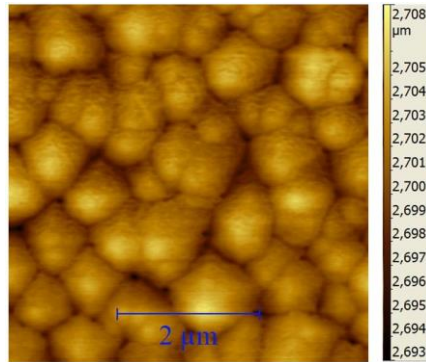
### 3. Рост и электрофизические параметры гетероструктур

Эпитаксиальные слои GaN и AlGa<sub>x</sub>N/GaN гетероструктуры (ГЭС) с двумерным электронным газом (2DEG) выращивались на подложке сапфира методом NH<sub>3</sub>-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 °С) в вакууме в течение одного часа. Затем подложка нитридизовалась в потоке аммиака 25 sccm в течении 10 min при температуре 840 °С, 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

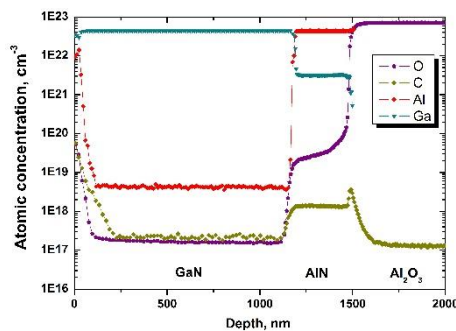
Слой	Толщина
«Сар»-слой GaN	2,0 nm
Барьерный слой Al <sub>x=0,27</sub> GaN:Si n-тип	15,0 nm
Барьерный слой i-Al <sub>x=0,27</sub> GaN	10,0 nm
Модификатор КЯ AlN	1,0 nm
Активный слой GaN	1000 nm
Буферный слой AlN	300 nm
Подложка Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	430 μm

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 nm (см. рис. 2).



**Рисунок 2.** Изображение поверхности слоя GaN полученные с помощью атомно-силового микроскопа размером 5x5 μm<sup>2</sup>, Z-шкала 15 nm, rms=2 nm.

Исследование буферных слоёв GaN методом вторичной ионной масс спектроскопии (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 μm и омическими контактами на основе металлизации Ti/Al/Ni/Au. ВАХ транзисторов с шириной затвора 90 μm приведены на рис. 4а. Удельная крутизна транзистора составила 250 mS/mm. Измеренный ток утечки закрытого транзистора при подаче запирающего напряжения -5 V и напряжении сток-исток  $U_{СИ} = 135 \text{ V}$  составил ~ 220 μA (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  $-5 \text{ V}$  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  $\text{A}_3\text{B}_5$  для СВЧ электроники и СВЧ фотоэлектроники». ВИМС 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.