

УДК 538.975

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ НАНОПЛЕНОК InN/Si, GaN/Si

© 2012 г. К. К. Абгарян¹, Д. И. Бажанов³, С. Ю. Михеев²,
И. В. Мутигуллин¹, Ю. А. Рыжов²

E-mail: kristal83@mail.ru

Разработан способ модифицированного магнетронного напыления гетероструктур на монокристаллические подложки, сочетающий экономическую эффективность и высокую производительность. Теоретическое моделирование выращенных структур, осуществленное в рамках теории функционала плотности, позволило определить наиболее стабильные позиции расположения атомов в интерфейсах InN/Si и GaN/Si.

ВВЕДЕНИЕ

Применение предсказательного компьютерного моделирования с использованием супер-ЭВМ в настоящее время позволило проводить детальные расчеты сложных явлений и процессов без натуральных экспериментов. Это в свою очередь дало возможность существенно удешевить и ускорить процессы разработки современных технологий получения новых наноматериалов. Кроме того, многие сложные физические процессы стали доступнее для детального научного исследования.

В последнее десятилетие в мире резко возрос интерес к широкозонным материалам (AlGaIn, GaN, SiC, алмаз и т.д.), которые рассматриваются как перспективные полупроводниковые материалы для изготовления новых электронных и оптоэлектронных приборов. Среди них GaN обладает уникальными свойствами и является общепризнанным полупроводниковым материалом следующего поколения. Многослойные структуры на основе широкозонных полупроводников имеют ряд фундаментальных преимуществ при использовании их в качестве материала при изготовлении СВЧ-транзисторов. В частности, их применение обеспечивает широкие возможности вариации зонной структуры приборов, получение двумерного электронного газа (2DEG) с высокими параметрами.

При выращивании гетероструктур с наноразмерными толщинами слоев принципиально важно понимание на микроскопическом уровне структуры интерфейсов и начальной стадии роста. С точ-

ки зрения технологических применений, наиболее удобным типом подложки для выращивания GaN является кремний – недорогой материал, повсеместно применяемый в микроэлектронике, к тому же его можно производить в виде широких пластин. Хорошо известно, что на начальной стадии напыления нитридных пленок может происходить нитридизация кремниевой подложки, сопровождающаяся образованием нитрида или оксинитрида кремния, что, в свою очередь, может приводить к ухудшению кристаллических свойств пленки нитрида и возникновению токов утечки [1]. Тем не менее экспериментально было продемонстрировано, что, контролируя процесс диффузии азота в подложку, можно вырастить монокристаллическую пленку GaN на кремниевой подложке без образования нитрида кремния [2]. Это было достигнуто методом молекулярно-лучевой эпитаксии, причем ось [0002] GaN была ориентирована вдоль оси [111] подложки. Другим методом, с помощью которого можно получать высококачественные полупроводниковые пленки на кремнии, является магнетронное напыление. В [3] с помощью магнетронного напыления получена монокристаллическая пленка InN с ориентацией (0001) на кремниевой подложке с ориентацией (111).

В данной работе проведено экспериментальное выращивание пленок GaN и InN на кремниевой подложке с помощью модифицированного магнетронного напыления, а также теоретически была исследована энергия адгезии этих пленок с подложкой.

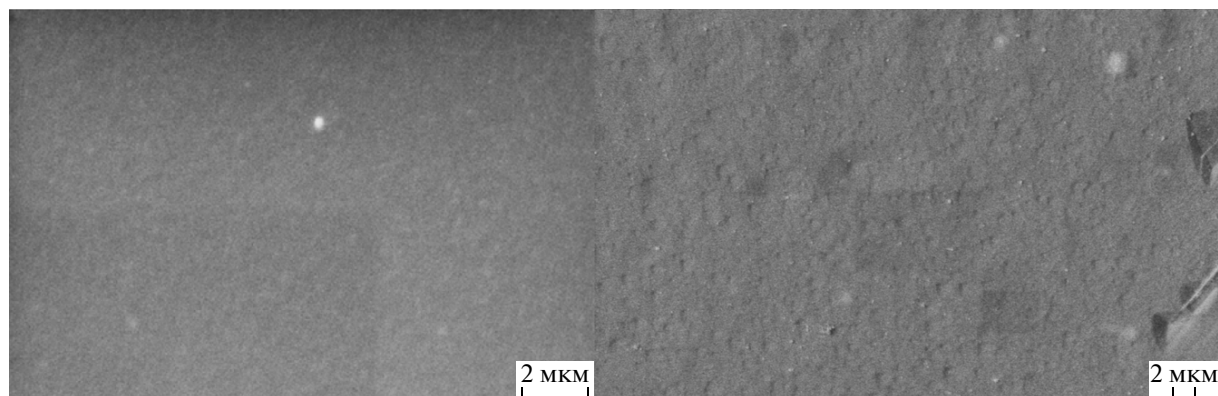
МЕТОДИКА

В ходе проведенных работ были спроектированы, изготовлены и испытаны основные устройства, обеспечивающие на вакуумной установке

¹ Учреждение Российской академии наук Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН (ВЦ РАН), Москва.

² Московский авиационный институт (технический университет).

³ Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова.



Изображения участков поверхностей пленок AlN и GaN, полученные с помощью растрового электронного микроскопа.

ВУП-4 напыление гетероструктур InN и GaN на монокристаллическую подложку. К этим устройствам относятся несбалансированный магнетрон с охлаждением жидким азотом; подогреватель подложки с автоматическим поддержанием температуры до 800°C с погрешностью $\pm 2^{\circ}$; устройство для плазменного травления напыленных пленок на диэлектрической подложке – микроскоритель с замкнутым дрейфом электронов; устройство для очистки поверхности подложки перед напылением гетероструктур; система напуска высокочистых газов Ar, N_2 , H_2 и их смесей в различных пропорциях. Достоинством разработанного метода является то, что все основные операции, необходимые для выращивания гетероструктур, к числу которых относятся нагрев и очистка подложки, магнетронное напыление полупроводниковых пленок, травление напыленной пленки, можно выполнять, не извлекая образец из вакуумной камеры.

С помощью разработанной методики проведено напыление GaN и InN на пластину монокристалла кремния размером 20×20 мм. Подложка располагалась на расстоянии 40 мм над магнетроном и нагревалась до температуры 300°C . Катод магнетрона был покрыт слоем галлия или индия толщиной 1 мм и при работе магнетрона охлаждался жидким азотом. Длительность напыления составляла 45 мин. В качестве рабочего газа использована смесь $\text{N}_2 + \text{H}_2$ в равном соотношении. Полученные образцы исследованы на растровом электронном микроскопе EVO-40 фирмы ZEISS при увеличениях до $\times 50000$. После исследования топографии поверхности напыленной пленки проведен энергодисперсионный анализ состава поверхности с помощью приставки INCA фирмы “Oxford Instruments”.

Теоретическое исследование проведено в рамках теории функционала электронной плотности с использованием базиса плоских волн и PAW-потенциалов [4]. Для расчетов применен программный комплекс VASP [5]. Для описания обменно-

корреляционного взаимодействия выбрано приближение локальной электронной плотности (ЛЭП, LDA). Для релаксации сил, действующих на ионы, использован метод сопряженных градиентов. Динамическая релаксация атомов проводилась до тех пор, пока изменение полной энергии системы не становилось меньше 0.001 эВ, при этом остаточные силы, действующие на ионы, были меньше 0.01 эВ/Å. Энергия обрезания базиса плоских волн выбрана равной 500 эВ. Расчеты электронной структуры осуществлены интегрированием в зоне Бриллюэна с использованием k -сетки, построенной по методу Монкхорста–Пака [6]. Размерность k -сетки для моделирования интерфейсов выбрана $11 \times 11 \times 1$. Представленные значения для перечисленных параметров расчетной схемы были достаточными для обеспечения надежности полученных результатов.

Структура интерфейсов InN/Si и GaN/Si моделированы с помощью периодических суперячеек в приближении периодических кристаллических пластин. Для этой цели использованы суперячейки размерностью (1×1) , состоящие из 10 атомных слоев кремния и 11 атомных слоев InN или GaN (6 слоев металла и 5 слоев азота). Толщина вакуумного слоя выбрана таким образом, чтобы две поверхности, образованные пластиной, не взаимодействовали друг с другом из-за периодических граничных условий.

Все расчеты проведены на суперкомпьютерах Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В результате проведенных экспериментов получены устойчивые пленки на поверхности кремниевой пластины, имеющие хорошую адгезию к подложке. Типичные изображения участков поверхности образцов представлены на рисунке. Видно, что напыленная пленка имеет достаточно

ровную поверхность и состоит из поликристаллов размером порядка 100 нм.

Анализ состава полученной пленки и поверхности катода магнетрона свидетельствует о том, что нитрид галлия образуется в напыленной пленке и на поверхности катода магнетрона. Однако напыленная пленка как в случае InN, так и в случае GaN содержит избыточное количество азота. Для получения монокристаллической пленки необходимого состава GaN и InN необходимо проведение серии экспериментов с изменением состава рабочего газа, режимов работы магнетрона и температуры подложки.

Для теоретического моделирования адгезии пленок GaN и InN на поверхности кремния проведена серия расчетов полных энергий когерентных интерфейсов N-полярных нитридов на кремнии: InN(0001)/Si(111) и GaN(0001)/Si(111). Расчеты различались типом прерывания поверхности нитрида, граничащей с кремниевой подложкой, — азотная или металлическая, а также взаимным расположением атомов, прерывающих поверхность подложки Si(111) и пленки InN(0001) или GaN(0001). Рассчитанные значения энергии адгезии для различных рассмотренных случаев приведены в таблице. Для обеих структур (GaN и InN) наиболее сильная связь между подложкой и пленкой характерна в случае прерывания поверхности пленки атомом азота, располагающимся непосредственно над поверхностным атомом кремния: $-2.55 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}$ и $-2.58 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}$ соответственно. При этом длина связи азот—кремний составляет 1.81 \AA в системе InN/Si и 1.80 \AA в системе GaN/Si.

В связи с тем что экспериментально выращенные структуры демонстрируют значительную концентрацию примесей, особую важность представляет теоретическое исследование влияния примесных атомов на адгезию пленки и подложки. В качестве типичной примеси, которая всегда присутствует в экспериментальных структурах, рассмотрен кислород. Для оценки влияния одиночного атома кислорода на адгезию интерфейса InN/Si была использована суперячейка большего размера — размерностью 3×3 . Проведенные ранее расчеты из первых принципов продемонстрировали, что кислород занимает позицию замещения в структуре InN [7], поэтому в наших расчетах один атом кислорода замещал атом азота на границе раздела. При этом была получена величина энергии адгезии $-2.20 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}$. Таким образом, наличие кислорода в структуре InN ухудшает связь выращенной пленки с кремниевой подложкой.

Рассчитанные энергии адгезии для различных вариантов геометрии интерфейсов InN(0001)/Si(111) и GaN(0001)/Si(111). Атому кремния поверхностного слоя подложки соответствует координата (0; 0), подповерхностного слоя — (2/3; 1/3)

Тип прерывания поверхности	Координата прерывающего атома	Энергия адгезии, $\text{Дж} \cdot \text{м}^{-2}$	
		InN	GaN
N	(1/2; 0)	-0.95	-1.16
N	(0; 0)	-2.55	-2.58
N	(1/3; 2/3)	-1.01	-1.02
N	(2/3; 1/3)	-0.59	-2.49
In	(1/2; 0)	-1.69	-2.38
In	(0; 0)	-1.61	-2.18
In	(1/3; 2/3)	-1.67	-2.23
In	(2/3; 1/3)	-1.57	

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработан модифицированный способ магнетронного напыления полупроводниковых гетероструктур, сочетающий экономическую эффективность и высокую производительность. С его помощью выращены стабильные структуры GaN и InN на кремнии. Проведенные расчеты из первых принципов позволили определить энергетически наиболее предпочтительное взаимное расположение атомов, прерывающих поверхность подложки кремния и пленок GaN и InN, а также оценить величину энергии адгезии, характерную для этих структур. Кроме того, проведена оценка влияния примесного атома кислорода в структуре InN на величину энергии адгезии пленки InN на поверхности кремния.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты № 10-08-01263-а, 09-01-13541-офи_ц).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kim J.W., Yeom H.W., Kong K.J. et al. // Phys. Rev. Lett. 2003. V. 90. 106101.
2. Rawdanowicz T.A., Narayan J. // Appl. Phys. Lett. 2004. V. 85. P. 133.
3. Guo Q., Ogata M., Ding Y. et al. // J. Crystal Growth. 2009. V. 311. № 10. P. 2783.
4. Blöchl P.E. // Phys. Rev. B. 1994. V. 50. P. 17953.
5. Kresse G., Furthmüller J. // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. № 16. P. 11169.
6. Monkhorst H., Pack J. // Phys. Rev. B. 1976. V. 13. № 12. P. 5188.
7. Stampfl C., C.G. Van de Walle, Vogel D. et al. // Phys. Rev. B. 2000. V. 61. № 12. P. R7846.