

表面钝化前后 $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结势垒层应变的高温特性*

张开晓^{1)†} 陈敦军²⁾ 沈波³⁾ 陶亚奇²⁾ 吴小山²⁾ 徐金²⁾ 张荣²⁾ 郑有²⁾

1) 河海大学理学院, 南京 210098)

2) 江苏省光电材料重点实验室, 国家微结构重点实验室, 南京大学物理系, 南京 210093)

3) 北京大学人工微结构和介观物理国家重点实验室, 北京大学宽禁带半导体研究中心, 北京 100871)

(2005 年 7 月 17 日收到, 2005 年 8 月 26 日收到修改稿)

用高分辨 X 射线衍射仪(HR-XRD)研究了表面钝化前后 $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结势垒层应变的高温特性, 温度变化范围从室温到 813K. 结果表明, 对未钝化的异质结, 当测试温度高于 523K 时, $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 势垒层开始出现应变弛豫. 钝化后, 在 $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 势垒层中会产生一个附加的平面拉伸应变, 并随着温度的增加, 势垒层中的平面拉伸应变会呈现出一个初始的增加, 接着应变将减小. 对 100nm 厚的 $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 势垒层, 应变只是轻微地减小, 但对于 50nm 厚的 $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 势垒层, 则出现了严重的应变弛豫现象.

关键词: $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结, 应变, Si_3N_4 钝化, 高温 XRD

PACC: 7280E, 7340L, 7320D, 7660E

1. 引言

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构被公认为是制备高温、高频、大功率电子器件最优选的材料体系, 它们在卫星、雷达和通讯等领域具有很大的应用潜力. 因此, 近年来, 基于 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构的场效应晶体管(HEMT)的研究得到了飞速发展^[1-3]. 其中, 可承受高的工作温度是 AlGaIn/GaN 优于 $\text{AlGaAs}/\text{GaAs}$ 体系的一个突出优点, 但由于蓝宝石衬底材料热导率较差, 使得器件的自热效应非常严重, 从而降低了器件的可靠性. 因此, 器件能否在高温下正常工作是 AlGaIn/GaN 异质结构大功率器件实用化过程中不可避免的一个问题. 由于 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 势垒层的应变对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构中二维电子气(2DEG)的浓度和输运性质都有着极为重要的影响^[4], 而表面钝化会引起势垒层的应变变化, 因此, 研究势垒层应变的高温行为以及表面钝化对势垒层应变的影响对进一步理解二维电子气的高温输运性

质和器件性能的高温衰退行为将是必不可少的.

文中采用变温高分辨 X 射线衍射(XRD)技术研究了具有全应变($\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 层厚 50nm)和应变部分弛豫($\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 层厚 100nm)的 $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结在其表面钝化前后势垒层应变的高温特性, 温度变化范围从室温到 813K.

2. 实 验

$\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构样品是采用金属有机物化学气相淀积(MOCVD)技术, 在(0001)蓝宝石衬底上外延生长得到. 首先, 在衬底上生长一层 GaN 缓冲层, 生长温度为 488°C; 然后在 1070°C 下生长一层厚度为 1.2 μm 的非故意掺杂的 GaN 层; 接着再生长一层约 3nm 厚的非故意掺杂的 $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 空间隔离层; 最后, 在 1080°C 下生长一层掺 Si 的 $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 势垒层, 其厚度分别为 50nm 和 100nm. Si_3N_4 表面钝化层是在 280°C 下采用射频离子增强化学气相淀积(PECVD)方法制备, 其厚度为 150nm.

* 国家重点基础研究专项基金(批准号: G20000683), 国家自然科学基金(批准号: 60406002, 60325413, 60136020), 江苏省自然科学基金(批准号: BK2003411), 国家高技术研究发展计划(863)项目(批准号: 2002AA305304)资助的课题.

† E-mail: kxzhang@hhu.edu.cn

高分辨 XRD 测试所采用的 X 射线源为 Cu 的 $K\alpha_1$ 线 ($\lambda = 1.5406\text{\AA}$), 变温范围从室温到 813K, 在每个温度测量点的保温时间为 15min.

3. 实验结果和讨论

3.1. $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结应变和弛豫

表 1 GaN 和 AlN 在不同温度下的弹性常数

T/K	GaN		AlN	
	C_{13}/GPa	C_{33}/GPa	C_{13}/GPa	C_{33}/GPa
300	98.1	384.4	98.9	384.3
400	97.4	382.3	98.5	383.4
500	96.7	380.0	98.1	382.1
600	96.0	377.8	97.7	380.8
700	95.3	375.5	97.2	379.4
800	94.5	373.3	96.7	377.9

六方结构的 III 族氮化物半导体的一个突出性质是具有很强的极化效应, 极化包括自发极化 P_{SP} 和压电极化 P_{PE} . 自发极化由晶格常数比的非理想性引起^[5]; 压电极化是由 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 界面处的应变效应和两种材料的晶格常数不匹配引起, 其压电极化强度表示为^[6]

$$E_{\text{PE}} = e_{33}\epsilon_z + e_{31}(\epsilon_x + \epsilon_y), \quad (1)$$

e_{33} 和 e_{31} 为压电极化常数, $\epsilon_z = (c - c_0)/c_0$ 和 $\epsilon_x = \epsilon_y = (a - a_0)/a_0$ 分别为 z 轴方向应变和平面内应变, 其中 a_0 和 c_0 为平衡晶格常数, z 轴方向应变和平面内应变关系为^[6]

$$\epsilon_z = -2 \frac{C_{13}}{C_{33}} \epsilon_x, \quad (2)$$

其中 C_{13} 和 C_{33} 为弹性常数, GaN 和 AlN 的弹性常数见表 1. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 和 GaN 之间的压电极化可以表示为^[7]

$$P_{\text{PE}} = (1 - R) \mathcal{D} \frac{a - a_0}{a_0} \left(e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right), \quad (3)$$

其中 R 为 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 层的应变弛豫度, 应变弛豫度是用来表示应变状态的, $R = 0$ 表示全应变, $R = 1$ 表示应变完全弛豫.

3.2. 实验结果分析

图 1 给出了势垒层为 100nm 厚的 $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结在高温 XRD 测量前后的室温 (0002) 面

$\omega/2\theta$ 扫描曲线. 高温 XRD 测量后, $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 势垒层的 (0002) 峰向小角度方向发生了移动, 即 $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 层的 c 轴晶格常数变大, 说明高温过程导致 $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 层发生了不可逆的晶格弛豫. 为了得到 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 层内温度依赖的晶格弛豫, 须先扣除热膨胀和 GaN 与 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 热失配的影响. 在计算 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的热膨胀系数时, 假设其热膨胀系数为 GaN 和 AlN 热膨胀系数按组分线性变化.

$$\alpha_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = x\alpha_{\text{AlN}} + (1 - x)\alpha_{\text{GaN}}, \quad (4)$$

GaN, AlN 和 Si_3N_4 的热膨胀系数 α 见表 2^[8-12].

表 2 GaN, AlN, Si_3N_4 不同温度下的热膨胀系数

T/K	GaN		AlN		Si_3N_4
	$\alpha_a/$ (10^{-6}K^{-1})	$\alpha_c/$ (10^{-6}K^{-1})	$\alpha_a/$ (10^{-6}K^{-1})	$\alpha_c/$ (10^{-6}K^{-1})	
300	3.8	2.0	2.5	1.8	3.7
400	3.8	2.8	3.5	2.7	4.0
500	4.3	3.1	3.8	3.1	4.2
600	5.5	5.4	4.2	3.5	4.4
700	5.7	5.8	4.5	4.0	
800	7.9	5.8	5.0	4.5	

由 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 和 GaN 层热失配引起的应变可由下式^[13]求出:

$$\Delta\epsilon_x = \frac{(\alpha_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} - \alpha_{\text{GaN}})\Delta T}{1 + \alpha_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}\Delta T}, \quad (5)$$

ΔT 为测试温度与室温之差. 这样, 就得到了扣除热膨胀和 GaN 与 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 热失配的影响后 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 层平面内的残余应变 $\epsilon'_x = (\epsilon_x - \Delta\epsilon_x)$ 随温度的变

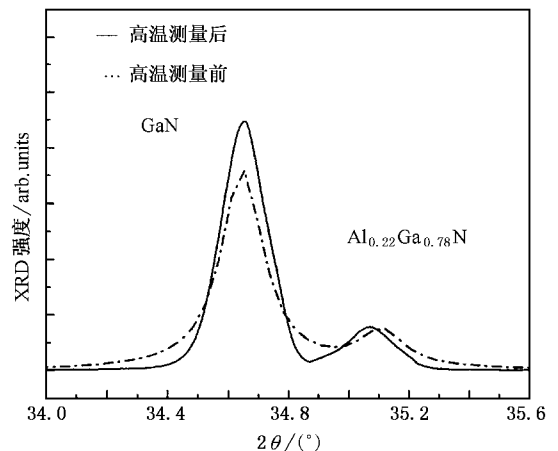


图 1 $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}/(100\text{nm})\text{GaN}$ 异质结在高温 XRD 测量前后的室温 (0002) 面 $\omega/2\theta$ 扫描曲线

化关系.

图 2 是 100nm 厚的 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层平面内的残余应变随温度的变化关系. 从图 2 可知, 对于表面未钝化的样品, 在室温至 523K 温度区间 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层平面内的残余应变基本不随温度变化; 但当温度超过 523K 时, 随着温度的升高, $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层平面内的残余应变随之减小, 说明当温度高于 523K 时 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层内开始出现应变弛豫, 这是因为温度升高会导致 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 体内缺陷浓度增大^[8], 同时, 热激活的位错滑移速率随温度的升高也会呈指数倍增加^[14], 从而致使受双轴拉应力的 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层在高温下产生了应变弛豫. 对于表面钝化后的样品, 在室温到 523K 温度区间内 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层平面内的应变随温度升高而增加, 这是由于在 510K 温度内多晶 Si_3N_4 层的热膨胀系数要大于 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层热膨胀系数所致^[15]. 当温度超过 523K 时, 随着温度的继续升高, $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层平面内的应变亦轻微减小. 这也与在高温下 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层内以及 $AlGaIn/GaN$ 和 $Si_3N_4/AlGaIn$ 界面处缺陷浓度的增加以及位错的滑移变得更容易有关. 另外, 在室温下, 钝化后的 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层内的张应变要比未钝化的约高 0.07%, 说明 Si_3N_4 钝化会在 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层内引入一个附加的拉应力, 这个附加的拉应力可以增加 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层的压电极化效应, 从而理论上可增加 $AlGaIn/GaN$ 异质结沟道 2DEG 浓度. 这一结果与文献报道的 Si_3N_4 钝化可以提高 $AlGaIn/GaN$ 异质结 HEMT's 器件的 2DEG 浓度相符合^[16].

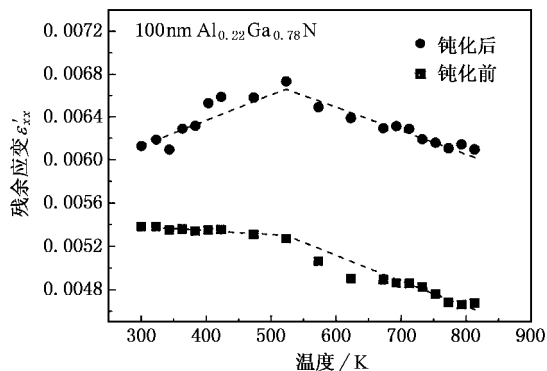


图 2 100nm 厚的 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层平面内的残余应变随温度的变化关系

图 3 是 50nm 厚的 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层平面内的残余应变随温度的变化关系. 未钝化的样品随温度的变

化规律与 100nm 厚的样品相似, 但对钝化后的样品, 当温度超过 473K 时, $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层内出现了明显的温度依赖的应变弛豫. 这是因为 50nm 厚的 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层已经比较接近应变弛豫的临界厚度 65nm^[17], 此时 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层体内的应变能密度已经达到了一个相当高的状态. 钝化后, 由于 Si_3N_4 在 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层中又引入了一个附加的张应变, 使得 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层内的张应变增大, 且随着温度的升高张应变进一步增大, 当温度达到 473K 时, 超过了其临界应变, 这样 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层就会通过体内位错的滑移和倍增甚至裂纹的产生来释放部分拉应力, 从而出现了明显的应变弛豫.

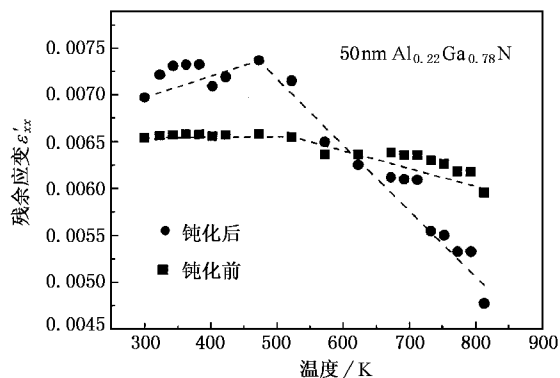


图 3 50nm 厚的 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层平面内的残余应变随温度的变化关系

图 4 给出了 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N/GaN$ 异质结中 50nm 厚的 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层的应变弛豫度与温度的关系. 从图 4 可以看出, 从室温到 500K 温度范围内, 钝化前后 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层内都未发生应变弛豫; 从 500K 到

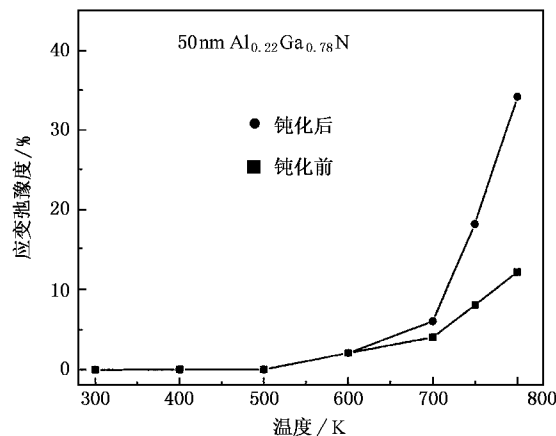


图 4 50nm 厚的 $Al_{0.22}Ga_{0.78}N$ 层的应变弛豫度与温度的关系

800K 的温度范围内,未钝化的 $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结中 $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 层内产生的应变弛豫度为 12% 左右,而钝化后的 $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 层内所产生的应变弛豫度为 34% 左右。

4. 结 论

综上所述,对未钝化的样品,在室温到 523K 温度范围内, $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 层平面内的残余应变基本保

持不变,当温度超过 523K 时应变开始弛豫,这是由于温度升高会使得缺陷浓度增大所造成。 Si_3N_4 钝化后,会在 $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 层中引入一个附加的张应变,且随温度的增加,由于 Si_3N_4 的热膨胀系数大于 $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 层的热膨胀系数,使得 $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 层内张应变会继续增加;当温度超过 473K 后,随着 $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 层内张应变的进一步增大,将导致接近 $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 临界厚度的样品出现明显的应变弛豫,在整个测试温度范围内,其应变弛豫度为 34% 左右。

- [1] Maeda N , Tsubaki K , Saitoh T , Kobayashi N 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 1634
- [2] Egawa T , Ishikawa H , Umeno M , Jimbo T 2000 *Appl. Phys. Lett.* **76** 121
- [3] Zhang C F , Hao Y , You H L , Zhang J F , Zhou X W 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 3810 (in Chinese) [张春福、郝跃、游海龙、张春风、周小伟 2005 物理学报 **54** 3810]
- [4] Kong Y C , Zheng Y D , Chu R M , Gu S L 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1756 (in Chinese) [孔月婵、郑有、储荣明、顾书林 2003 物理学报 **52** 1756]
- [5] Bernardini F , Fiorentini V , Vanderbilt D 1997 *Phys. Rev. B* **56** R10024
- [6] Ambacher O , Smart J , Shealy J R , Weimann N G , Chu K , Murphy M , Schaff W J , Eastman L F 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 3222
- [7] Kong Y C , Zheng Y D , Zhou C H , Den Y Z , Gu S L , Shen B , Zhang R , Han P , Jiang R L , Shi Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2320 (in Chinese) [孔月婵、郑有、周春红、邓永桢、顾书林、沈波、张荣、韩平、江若琏、施毅 2004 物理学报 **53** 2320]
- [8] Leszczynski M , Suski T , Teisseyre H , Perlin P , Grzegory I , Jun J , Porowski S , Moustakas T D 1994 *J. Appl. Phys.* **76** 4909
- [9] Slack G A , Bartram S F 1975 *J. Appl. Phys.* **46** 89
- [10] Yim W M , Paff R J 1974 *J. Appl. Phys.* **45** 1456
- [11] Meada M , Ikeda K 1998 *J. Appl. Phys.* **83** 3685
- [12] Reeber R R , Wang K 2001 *MRS Internet J. Nitride Semicond. Res.* **6** 1
- [13] Steude G , Meyer B K , Golder A , Hoffmann A , Kaschner A , Bechstedt F , Amano H , Akasaki I 1999 *Jpn. J. Appl. Phys. Part 2* **38** L498
- [14] Sugiura L 1997 *J. Appl. Phys.* **81** 1633
- [15] Wang C Z , Wang E G , Dai Q Y 1998 *J. Appl. Phys.* **83** 1975
- [16] Green B M , Chu K K , Chumbes E M , Smart J A , Shealy J R , Eastman L F 2000 *IEEE Electron Devices Lett.* **21** 268
- [17] Shen B , Someya T , Arakawa Y 2000 *Appl. Phys. Lett.* **76** 2746

The effects of passivation and temperature on the barrier strain of $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}/\text{GaN}$ heterostructures^{*}

Zhang Kai-Xiao^{1,2)†} Chen Dun-Jun²⁾ Shen Bo³⁾ Tao Ya-Qi²⁾ Wu Xiao-Shan²⁾ Xu Jin²⁾
Zhang Rong²⁾ Zheng You-Dou²⁾

¹ College of Science, Hehai University, Nanjing 210098, China)

² Key Laboratory of Advanced Photonic and Electronic Materials, Department of Physics, Nanjing University, Nanjing 210093, China)

³ State Key Laboratory of Artificial Microstructure and Mesoscopic Physics, School of Physics and Center for Wide Band-Gap Research, Peking University, Beijing 100871, China)

(Received 17 July 2005 ; revised manuscript received 26 August 2005)

Abstract

The barrier strain in $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}/\text{GaN}$ heterostructure, with and without Si_3N_4 passivation layer, was investigated at temperatures from room temperature to 813K by using high resolution X-ray diffraction. The strain relaxation occurs when the temperature exceeds 523K for the unpassivated $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ layers. After passivation, an initial increase of the strain with increasing temperature is observed in $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ layers, and at the higher temperatures the strain only decreases slightly in the 100-nm-thick $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ layer, but a pronounced strain relaxation occurs in the 50-nm-thick one due to the fact that the thickness of the $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ layer is close to the critical thickness, and hence the increase of tensile strain induced by passivation will result in partial strain relaxation via the formation of cracks or the gliding motion and multiplication of dislocations.

Keywords : $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}/\text{GaN}$ heterostructure, strain, Si_3N_4 passivation, high temperature XRD

PACC : 7280E, 7340L, 7320D, 7660E

^{*} Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. G20000683), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 60406002, 60325413 and 60136020), the Natural Science Foundation of Jiangsu Province (Grant No. BK2003411), and the National High Technology Research & Development Project of China (Grant No. 2002AA305304).

[†] E-mail : kxzhang@hhu.edu.cn