

# $r$ 面蓝宝石衬底上采用两步 AlN 缓冲层法外延生长 $a$ 面 GaN 薄膜及应力研究\*

颜建锋<sup>†</sup> 张 洁 郭丽伟 朱学亮 彭铭曾 贾海强 陈 弘 周均铭

(中国科学院物理研究所, 北京凝聚态物理国家实验室, 北京 100080)

**摘要:** 采用 MOCVD 技术在  $r$  面蓝宝石衬底上采用两步 AlN 缓冲层法外延制备了  $a$  面 GaN 薄膜. 利用高分辨 X 射线衍射技术和 Raman 散射技术分析了样品的质量以及外延膜中的残余应力. 实验结果表明: 样品的  $(11\bar{2}0)$  面的 X 射线双晶摇摆曲线的半峰宽仅为  $0.193^\circ$ , Raman 光谱中  $E_2$  高频模的半峰宽仅为  $3.9\text{cm}^{-1}$ , 这些说明  $a$  面 GaN 薄膜具有较好的晶体质量; X 射线研究结果表明样品与衬底的位相关系为:  $[11\bar{2}0]_{\text{GaN}} \parallel [1\bar{1}02]_{\text{sapphire}}$ ,  $[0001]_{\text{GaN}} \parallel [1\bar{1}01]_{\text{sapphire}}$  和  $[1\bar{1}00]_{\text{GaN}} \parallel [11\bar{2}0]_{\text{sapphire}}$ ; 高分辨 X 射线和 Raman 散射谱的残余应力研究表明, 采用两步 AlN 缓冲层法制备的  $a$  面 GaN 薄膜在平面内的残余应力大小与用低温 GaN 缓冲层法制备的  $a$  面 GaN 薄膜不同, 我们认为这是由引入 AlN 带来的晶格失配和热失配的变化引起的.

**关键词:** GaN; 非极性; X 射线衍射; Raman 谱; 残余应力

**PACC:** 7280E; 6855; 7830

**中图分类号:** TN304.2<sup>+</sup>3

**文献标识码:** A

**文章编号:** 0253-4177(2007)10-1562-06

## 1 引言

近年来, III 族氮化物在光电子和微电子领域都取得了很大的进展<sup>[1~3]</sup>. 由于难以获得体材料, 使得 III 族氮化物材料主要异质外延生长在其他衬底上, 蓝宝石是最常用的衬底, 目前绝大多数的 GaN 基发光二极管(LED)和激光器(LD)都是外延在  $c$  面蓝宝石衬底上. 而在  $c$  面蓝宝石上得到的  $c$  面 III-V 族氮化物材料的结构不具有中心反演对称性, 并且 III 族元素的原子和 N 原子的电负性相差很大, 导致 GaN 及其异质结在  $\langle 0001 \rangle$  方向具有很强的自发极化和压电极化, 极化效应的存在对材料特性和器件的性能有重要的影响. 极化效应在 III-V 族氮化物外延层中产生较高强度的内建电场<sup>[4~6]</sup>, 内建电场的存在使能带弯曲、倾斜, 能级位置发生变化, 发光波长发生红移; 同时由界面电荷产生的电场还会使正负载流子在空间上分离, 电子与空穴波函数的交迭变小, 使材料的发光效率大大的降低<sup>[4~9]</sup>. 为了减小极化电场对量子阱发光效率的影响, 人们尝试通过对 LED 器件结构的优化设计, 调节材料的应力, 达到减小极化效应的目的<sup>[10]</sup>. 然而, 这些尝试对减小极化效应的作用是有限的, 避开极化效应的最根本方法是生长非极性面的 GaN 基材料, 从而彻底消除

极化效应的影响. 目前普遍采用的用于制备非极性 GaN 基材料的技术途径有两种: (1) 在  $\gamma\text{-LiAlO}_2$  的衬底上利用 MBE 技术生长  $(1\bar{1}00)$   $m$  面 GaN<sup>[11,12]</sup>; (2) 在  $r$  面  $(1\bar{1}02)$  蓝宝石衬底上用 MBE, MOCVD 和 HVPE 技术生长  $a$  面  $(11\bar{2}0)$  GaN 材料<sup>[13~16]</sup>. 与  $\gamma\text{-LiAlO}_2$  相比,  $r$  面蓝宝石因其高温下稳定, 且在其上生长的 GaN 材料背底掺杂浓度低等原因, 是一种更有前途的衬底材料, 因此  $r$  面蓝宝石上生长  $a$  面 GaN 成为这一领域的研究热点. 通常, 人们利用低温 GaN<sup>[14,17~19]</sup> 或高温 AlN<sup>[15]</sup> 作为缓冲层, 在  $r$  面蓝宝石上生长  $a$  面 GaN 薄膜. 但得到的材料质量与生长在  $c$  面蓝宝石上的  $c$  面 GaN 相比, 还相差很远, 还不能满足高性能器件对材料质量的要求. 所以, 生长高质量的  $a$  面 GaN 仍是当前的研究重点.

本文的目的就在于通过引入两步 AlN 缓冲层的方法, 提高在  $r$  面蓝宝石上生长  $a$  面 GaN 的质量, 同时通过研究  $a$  面 GaN 外延膜中的应力, 进一步改进材料的质量.

## 2 实验

实验中采用金属有机物化学气相沉积 (MOCVD) 设备在  $r$  面  $(1\bar{1}02)$  蓝宝石 (sapphire) 衬

\* 国家自然科学基金(批准号:10474126,10574148), 国家高技术研究发展计划(批准号:2006AA03A107,2006AA03A106)和国家重点基础研究发展规划(批准号:2002CB311900)资助项目

<sup>†</sup> 通信作者. Email: jfyanmail@yahoo.com.cn

2007-04-16 收到, 2007-04-29 定稿

<i>a</i> 面 GaN 外延层 1500nm
高温 AlN 缓冲层 400nm
低温 AlN 缓冲层 40nm
<i>r</i> 面 sapphire 衬底

图 1 利用两步 AlN 缓冲层技术生长的 *a* 面 GaN 外延膜的结构示意图

Fig.1 Schematic structure of *a*-plane GaN film grown by two-step AlN buffer

底上外延生长 *a* 面(11 $\bar{2}$ 0) GaN 薄膜, 其中 Ga, Al 和 N 源分别为三甲基镓(TMGa)、三甲基铝(TMAI)和氨气(NH<sub>3</sub>). 在外延材料生长前, 首先在氢气氛围中把蓝宝石衬底加热到 1150℃ 处理 10min, 以便去除衬底表面的杂质. 在外延生长过程中, 首先在 800℃ 生长 40nm 厚的低温 AlN 缓冲层, 然后把生长温度升高到 1080℃, 再生长 400nm 厚的高温 AlN 缓冲层, 最后在此温度下生长约 1.5μm 厚的 *a* 面 GaN, GaN 的生长速率为 2.0μm/h. 具体的生长结构如图 1 所示.

高分辨 X 射线衍射(HRAXRD)技术是一种无损伤的研究材料结构的方法. 我们采用英国 Bede 公司生产的 D1 型多功能高分辨 X 射线衍射仪(三晶轴配置)进行  $\omega/2\theta$  对称、非对称扫描以及对称衍射的倒空间 Mapping 衍射(RSM)的测试方式进行了 4 种不同的扫描测量:(1)对样品的(11 $\bar{2}$ 0)对称衍射面进行双轴的  $\omega-2\theta$  扫描和倒空间 Mapping 衍射(RSM)的测试;(2)对样品的(11 $\bar{2}$ 0)衍射面进行  $\omega$  双晶摇摆曲线扫描;(3)对样品的(10 $\bar{1}$ 0), (10 $\bar{1}$ 1)和蓝宝石衬底的(0006)面进行  $\phi$  转动扫描;(4)对样品的(11 $\bar{2}$ 0), (11 $\bar{2}$ 2)和(10 $\bar{1}$ 0)面进行三晶轴高分辨  $\omega-2\theta$  扫描. 单色器采用 4 次反射的斜切 Si(220) 晶体组合, 经单色器出射后的 CuK $\alpha$ 1 波长为 0.154056nm, 高分辨  $\omega/2\theta$  扫描曲线的分辨率为 0.0001°. 分析晶体为 2 次反射的斜切 Si(220) 晶体. 采用法国 Jobin-Yvon T6400 型 Raman 光谱仪对样品进行 Raman 光谱测量, 激发光为 Verdi-2 型激光器的 532nm 谱线. 532nm 谱线激发下光谱的分辨率为 0.5cm<sup>-1</sup> 左右.

### 3 结果与讨论

图 2 给出了厚度为 1.5μm 厚的 *a* 面 GaN 薄膜的高分辨 XRD  $\omega-2\theta$  扫描的衍射图, 图中的衍射峰分别来源于 GaN 的(11 $\bar{2}$ 0)面, 微弱的 AlN 缓冲层的(11 $\bar{2}$ 0)面, 以及 *r* 面蓝宝石衬底的(1 $\bar{1}$ 02), (2 $\bar{2}$ 04)和(3 $\bar{3}$ 06)面的衍射. 在测量精度范围之内没有观测到 GaN 的(0002)及其他面的衍射峰, 这表明我们获得的外延材料是单一取向的 *a* 面(11 $\bar{2}$ 0)GaN. 插图

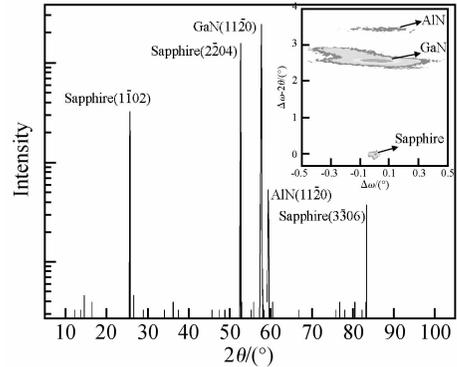


图 2 样品沿 GaN(11 $\bar{2}$ 0)衍射面的高分辨 X 射线对称  $\omega-2\theta$  扫描图, 插图为(11 $\bar{2}$ 0)面的倒空间 X 射线衍射图

Fig.2 Symmetric HRAXRD  $\omega-2\theta$  scan from GaN (11 $\bar{2}$ 0) Inset shows RSM around GaN (11 $\bar{2}$ 0) diffraction.

中为 *a* 面 GaN 薄膜(11 $\bar{2}$ 0)面的倒空间 Mapping 衍射图, 图中仅观察到 GaN(11 $\bar{2}$ 0)面、AlN(11 $\bar{2}$ 0)面、蓝宝石衬底的(1 $\bar{1}$ 02)面衍射峰, 更进一步证明了我们获得的外延薄膜是沿着 GaN[11 $\bar{2}$ 0]单一取向的.

我们通过对称面的  $\omega-2\theta$  扫描得到样品和衬底的晶向排列关系为 [11 $\bar{2}$ 0]<sub>GaN</sub> || [1 $\bar{1}$ 02]<sub>sapphire</sub>. 下面我们将通过非对称面的衍射峰来确定样品与衬底在生长面内的晶向排列关系. 分别将衍射面调到 GaN 的(10 $\bar{1}$ 0), (10 $\bar{1}$ 1)和蓝宝石的(000 $\bar{6}$ )面后, 进行  $\phi$  转动扫描, 扫描曲线如图 3 所示.

通过分析样品与衬底衍射点的  $\phi$  角位置关系, 可以确定样品与衬底在生长方向平面内的晶向关系为: [0001]<sub>GaN</sub> || [ $\bar{1}$ 101]<sub>sapphire</sub> 和 [ $\bar{1}$ 100]<sub>GaN</sub> || [11 $\bar{2}$ 0]<sub>sapphire</sub>, 具体的位相关系如图 4 所示. 这个结果与文献中利用低温 GaN 作为缓冲层生长获得的 *a* 面 GaN 与衬底之间的晶向排列关系是一致的<sup>[14,20]</sup>,

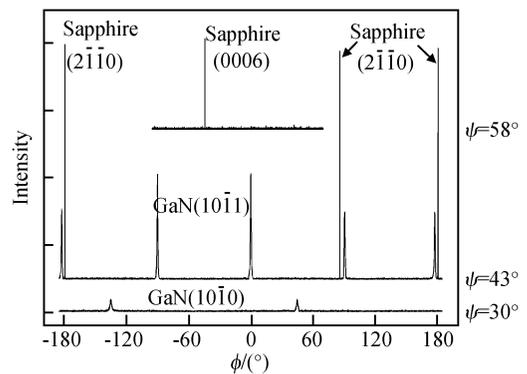


图 3 样品沿 GaN(10 $\bar{1}$ 0), GaN(10 $\bar{1}$ 1)和蓝宝石(000 $\bar{6}$ )面的  $\phi$  扫描曲线

Fig.3 Asymmetric  $\phi$  scans from GaN (10 $\bar{1}$ 0), GaN (10 $\bar{1}$ 1) and sapphire (000 $\bar{6}$ )

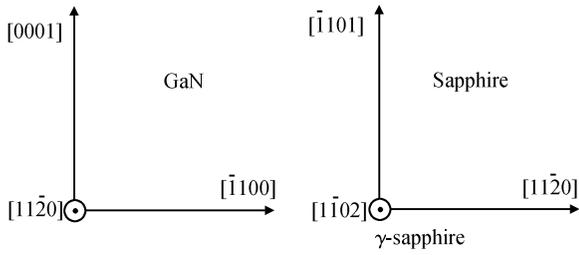


图 4 生长在  $r$  面 sapphire 上的  $a$  面 GaN 与衬底的取向关系  
Fig. 4 Orientation relationship between  $a$ -plane GaN and  $r$ -plane sapphire

说明我们采用两步 AlN 缓冲层方法外延的  $a$  面 GaN 薄膜与衬底之间的晶向关系与采用低温 GaN 作为缓冲层外延的  $a$  面 GaN 薄膜与衬底之间的晶向关系是相同的。

摇摆曲线的半峰宽的大小常被用来表征样品的质量. 采用两步 AlN 缓冲层的方法在  $r$  面蓝宝石衬底生长的  $a$  面 GaN 薄膜(11 $\bar{2}0$ )面的 X 射线双晶摇摆曲线的(图中未给出)半峰宽为  $0.193^\circ$ . 文献中报道的采用低温 GaN 作为缓冲层外延获得的  $a$  面 GaN 薄膜(11 $\bar{2}0$ )面的 X 射线双晶摇摆曲线的半峰宽为  $0.24^\circ \sim 0.29^\circ$ <sup>[14,17]</sup>; 采用单层高温 AlN 作为缓冲层外延获得的  $a$  面 GaN 薄膜(11 $\bar{2}0$ )面的 X 射线双晶摇摆曲线的半峰宽最小值也在  $0.29^\circ$  左右<sup>[15]</sup>. 我们获得的  $0.193^\circ$  的半峰宽与文献中报道的采用 HVPE 侧向外延生长的  $a$  面 GaN 的最好结果  $0.20^\circ$  亦相当<sup>[21]</sup>, 这说明我们已经获得了较高质量的  $a$  面 GaN 薄膜, 虽然这个值与生长在  $c$  面蓝宝石衬底上的  $c$  面 GaN 的值(约为  $200''$ ) 相比还有一定的距离. 在这里我们把  $a$  面 GaN 薄膜晶体质量的提高归于两步 AlN 缓冲层的作用. 低温缓冲层生长时由于生长温度较低, Al 原子的迁移能力比 Ga 原子低很多, 在这个温度下生长的 AlN 与低温 GaN 相比各向异性差异较小, 可以避免在低温 GaN 或高温 AlN 作为缓冲层生长引入的各向异性问题, 而随后在低温 AlN 层上继续生长的高温 AlN 层晶体质量较高, 这就为后续生长  $a$  面 GaN 提供了一个高质量的生长“模板”, 有利于  $a$  面 GaN 薄膜质量的改善.

由于  $a$  面 GaN 和  $r$  面蓝宝石衬底之间晶格失配很大, 且平面内各向异性, 因此有必要研究  $a$  面 GaN 薄膜的应力分布, 这对于改善材料的质量有着重要的意义.

我们通过对样品的对称(11 $\bar{2}0$ )面、非对称(11 $\bar{2}\bar{2}$ )和非对称(10 $\bar{1}0$ )面进行三晶轴高分辨  $\omega$ - $2\theta$  扫描可以得到各个面的衍射角, 再由布拉格公式及各个面之间的关系, 可计算出  $a$  面 GaN 外延膜的晶格常数  $a$ ,  $c$  和(11 $\bar{2}00$ )面间距  $d_{(11\bar{2}00)}$ . 在这里我们规定

表 1 GaN, AlN 和蓝宝石衬底的晶格常数、弹性刚度系数和热膨胀系数

Table 1 Lattice constants, elastic stiffness constants and thermal expansion coefficients of GaN, AlN and sapphire

	晶格常数/nm		弹性刚度系数/GPa				热膨胀系数/ $10^{-6}K^{-1}$	
	$c$	$a$	$c_{11}$	$c_{12}$	$c_{13}$	$c_{33}$	$c$	$a$
GaN	0.5185	0.3189	390	145	106	398	3.17	5.59
AlN	0.4982	0.3113	345	125	120	395	5.3	4.2
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1.299	0.4758	—	—	—	8.5	7.5	

$X \parallel [11\bar{2}0]_{\text{GaN}}$ ,  $Y \parallel [1\bar{1}00]_{\text{GaN}}$  和  $Z \parallel [0001]_{\text{GaN}}$ . 再由公式:

$$\epsilon_{XX} = \frac{a_{\text{epi}} - a_0}{a_0}, \epsilon_{YY} = \frac{m_{\text{epi}} - m_0}{m_0}, \epsilon_{ZZ} = \frac{c_{\text{epi}} - c_0}{c_0} \quad (1)$$

可以计算外延膜沿着样品各个方向的应变, 其中  $a_0$ ,  $m_0$  和  $c_0$  是无应变的 GaN 体材料的晶格常数(具体值见表 1). 计算结果见表 2.

最后由样品沿着各个方向的应变及下面的公式可以计算出样品沿着各个方向的应力:

$$\begin{cases} \sigma_{XX} = c_{11}\epsilon_{XX} + c_{12}\epsilon_{YY} + c_{13}\epsilon_{ZZ} \\ \sigma_{YY} = c_{12}\epsilon_{XX} + c_{11}\epsilon_{YY} + c_{13}\epsilon_{ZZ} \\ \sigma_{ZZ} = c_{13}\epsilon_{XX} + c_{13}\epsilon_{YY} + c_{33}\epsilon_{ZZ} \end{cases} \quad (2)$$

其中  $c_{11}$ ,  $c_{12}$ ,  $c_{13}$  和  $c_{33}$  为 GaN 的弹性刚度系数(具体值见表 1). 通过计算我们得到了样品沿不同方向的应力, 计算结果见表 2. 我们得到样品沿  $m$  轴方向的应力为  $\sigma_{YY\text{GaN}} = -2.61\text{GPa}$ , 沿  $c$  轴方向的应力为  $\sigma_{ZZ\text{GaN}} = +0.61\text{GPa}$ , 表明我们采用两步 AlN 作为缓冲层生长获得的  $a$  面 GaN 在外延层平面内的应力也存在着很大的各向异性. 沿  $c$  轴的原子间距被拉伸, 沿  $m$  面方向的原子间距被压缩.

我们知道, Raman 光谱中声子频率对应变非常敏感<sup>[22]</sup>. 下面我们就利用 Raman 散射谱来研究所获得样品的应力分布情况.

图 5 给出了样品在[11 $\bar{2}0$ ]背散射配置下的 Raman 散射谱. 在  $X(YY)\bar{X}$  配置下, GaN 的  $E_2$  低频模,  $A_1(\text{TO})$  模和  $E_2$  高频模分别位于  $142.5, 535.5$  和  $570.7\text{cm}^{-1}$ ; 在  $X(ZY)\bar{X}$  配置下, GaN 只有

表 2 样品沿不同方向的晶格常数、应变和应力值

Table 2 Lattice constants, strain and stress of GaN along different directions

座标轴	$x$	$y$	$z$
晶 轴	$a$ -axis	$m$ -axis	$c$ -axis
晶格常数/nm	$a = 0.3196$	$d_{(11\bar{2}00)} = 0.2770$	$c = 0.5142$
应 变	$\epsilon_{XX\text{GaN}} = +0.00226$	$\epsilon_{YY\text{GaN}} = +0.00316$	$\epsilon_{ZZ\text{GaN}} = -0.00839$
应力/GPa	$\sigma_{XX\text{GaN}} = 0$	$\sigma_{YY\text{GaN}} = -2.61$	$\sigma_{ZZ\text{GaN}} = +0.61$

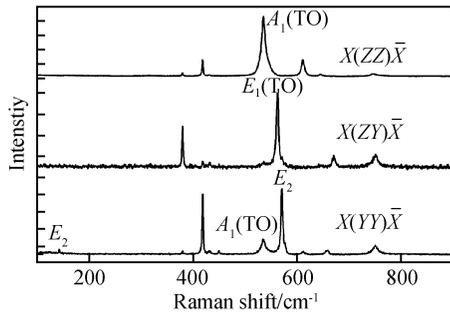


图 5 不同背散射配置下  $a$  面 GaN 薄膜的室温 Raman 谱 (532nm 光激发)

Fig. 5 Room temperature Raman shift of  $a$ -plane GaN under different back scattering configurations (excited by 532nm laser line)

$E_1(\text{TO})$  模出现, 位于  $562.0\text{cm}^{-1}$ ; 在  $X(\text{ZZ})\bar{X}$  配置下, GaN 只出现了位于  $535.5\text{cm}^{-1}$  的  $A_1(\text{TO})$  模. 此外,  $E_2$  高频模的半峰宽仅为  $3.9\text{cm}^{-1}$ , 表明晶体中的应变不均匀效应不明显, 这也从另外一个角度证明了我们生长的样品具有较高的质量.

由于生长的  $a$  面 GaN 存在平面内的应变各项异性, 而 Raman 光谱中声子频率对应变非常敏感<sup>[22]</sup>. 对于 Raman 声子模  $\lambda$ , 其声子频率移动与应力的关系可以用下面的公式表示:

$$\Delta\omega_\lambda = a_\lambda\sigma_{YY} + b_\lambda\sigma_{ZZ} \quad (3)$$

其中  $Y \parallel [1\bar{1}00]_{\text{GaN}}$  和  $Z \parallel [0001]_{\text{GaN}}$ . 我们采用 Wagne 和 Bechstedt 计算中用到的形变常数  $a_\lambda$  和  $b_\lambda$  (具体值见表 3) 来计算样品中的应力<sup>[22]</sup>.

参考声子  $E_1(\text{TO})$  模和  $E_2$  高频模的无应力状态的频率分别为  $559$  和  $568\text{cm}^{-1}$ <sup>[23]</sup>. 样品中的  $E_1(\text{TO})$  模和  $E_2$  高频模的频率分别是  $562.0$  和  $570.7\text{cm}^{-1}$ . 我们计算得到  $a$  面 GaN 的平面内的应力为:  $\sigma_{YY\text{GaN}} = -2.87\text{GPa}$  和  $\sigma_{ZZ\text{GaN}} = +0.66\text{GPa}$ . 这个计算结果在考虑误差范围内与 X 射线的结果是一致的, 说明用这两种方法来衡量薄膜中的剩余应力是可行、有效的. 这个值与利用低温 GaN 作为缓冲层生长  $a$  面 GaN 的平面内应力情况不同 ( $\sigma'_{YY\text{GaN}} = -1.61\text{GPa}$  和  $\sigma'_{ZZ\text{GaN}} = -0.15\text{GPa}$ )<sup>[17]</sup>. 利用低温 GaN 作为缓冲层制备的  $a$  面 GaN, 其  $c$

表 3 GaN 的形变常数  $a_\lambda$  和  $b_\lambda$  及声子波数的理论、实验值  
Table 3 Phonon deformation potentials  $a_\lambda$  and  $b_\lambda$  for GaN and its phonon frequencies from theoretical calculation and experimental observations

GaN 的形变常数及声子波数的理论、实验值	$a_\lambda$ /( $\text{cm}^{-1}$ ) /(Gpa)	$b_\lambda$ /( $\text{cm}^{-1}$ ) /(Gpa)	声子波数 理论值 / $\text{cm}^{-1}$	声子波数 实验值 / $\text{cm}^{-1}$
$E_1(\text{TO})$ 模	-1.23	-0.8	559	562.0
$E_2$ 高频模	-1.20	-1.12	568	570.7

轴的原子间距被压缩, 恰好与我们采用 AlN 缓冲层的情形相反. 我们综合考虑材料的晶格失配和热失配对剩余应力的影响, 分析结果如下: 由于  $a$  面 GaN 沿着 GaN[0001] 方向与衬底的晶格失配很小, 仅为 1.3%, 而且 AlN 的晶格常数与 GaN 的晶格常数相差不大 (具体值见表 1), 采用两步 AlN 作为缓冲层后, AlN 与蓝宝石衬底间的失配与  $a$  面 GaN 与  $r$  面蓝宝石衬底间的晶格失配的差别较小. 然而, 由于 AlN 沿着  $c$  轴方向的热膨胀系数比蓝宝石衬底要小很多, 在样品由生长温度冷却到室温时, 采用 AlN 作为缓冲层生长获得的  $a$  面 GaN 与采用低温 GaN 作为缓冲层生长获得的  $a$  面 GaN 相比相当于沿 GaN[0001] 方向上受到了额外的张应变, 所以导致  $a$  面 GaN 在面内沿 GaN[0001] 方向受到张应力. 而对于样品沿 GaN  $[\bar{1}100]m$  轴方向的压应力情形则不同, 虽然 AlN 的引入也带来了热膨胀系数的差异, 也会对样品沿 GaN  $[\bar{1}100]m$  轴方向的压力有一定的影响, 但在这里它不是主要的影响因素, 这是由于  $a$  面 GaN 沿着 GaN  $[\bar{1}100]m$  轴方向与衬底的晶格失配很大, 高达 16%, 晶格失配的影响在这里起了主要的作用. 由于 AlN  $[\bar{1}100]m$  轴的晶格常数比 GaN 和蓝宝石衬底都小的多, 这就相当于采用 AlN 作为缓冲层生长获得的  $a$  面 GaN 与采用低温 GaN 作为缓冲层生长获得的  $a$  面 GaN 相比在沿 GaN  $[\bar{1}100]m$  轴方向上受到了额外的压应力, 所以  $a$  面 GaN 在平面内沿 GaN[0001]  $c$  轴方向的压应力会变强.

## 4 结论

本文通过采用两步 AlN 缓冲层的方法在  $r$  面蓝宝石衬底上制备出了高质量的  $a$  面 GaN 薄膜.  $a$  面 GaN 外延薄膜的  $(11\bar{2}0)$  面的 X 射线双晶摇摆曲线的半峰宽仅为  $0.193^\circ$ , Raman 光谱中  $E_2$  高频模的半峰宽仅为  $3.9\text{cm}^{-1}$  都表明  $a$  面 GaN 薄膜具有较高的晶体质量.  $a$  面 GaN 外延层与  $r$  面蓝宝石衬底的晶向排列关系为:  $[11\bar{2}0]_{\text{GaN}} \parallel [1\bar{1}02]_{\text{sapphire}}$ ,  $[0001]_{\text{GaN}} \parallel [\bar{1}101]_{\text{sapphire}}$  和  $[\bar{1}100]_{\text{GaN}} \parallel [11\bar{2}0]_{\text{sapphire}}$ .  $a$  面 GaN 外延层在平面内的应力分布存在各向异性. 采用 AlN 作为缓冲层生长获得的  $a$  面 GaN 与采用低温 GaN 作为缓冲层生长获得的  $a$  面 GaN 相比沿 GaN  $c$  轴方向的张应力主要是由于 AlN 的引入带来新的热失配影响; 而在沿 GaN  $m$  轴方向的压应力会变强则是主要由于 AlN 的引入带来新的晶格失配的影响. 因此, 可以通过优化 AlN 缓冲层的生长参数来进一步改善在其上生长的  $a$  面 GaN 薄膜的质量, 最终获得能够满足器件性能要求的  $a$  面 GaN 薄膜.

## 参考文献

- [1] Nakamura S, Senoh M, Mukai T. Highly p-typed Mg-doped GaN films grown with GaN buffer layers. *Jpn J Appl Phys*, 1991, 30(10A):L1708
- [2] Asif Khan M, Bhattarai A, Kuznia J N, et al. High electron mobility transistor based on a GaN-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N heterojunction. *Appl Phys Lett*, 1993, 63(9):1214
- [3] Morkoc H, Strite S, Gao G B, et al. M Large-band-gap SiC, III-V nitride, and II-VI ZnSe-based semiconductor device technologies. *J Appl Phys*, 1994, 76(3):1363
- [4] Seo I J, Kollmer H, Off J, et al. Reduction of oscillator strength due to piezoelectric fields in GaN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N quantum wells. *Phys Rev B*, 1998, 57(16):R9435
- [5] Langer R, Simon J, Ortiz V, et al. Giant electric fields in unstrained GaN single quantum wells. *Appl Phys Lett*, 1999, 74(25):3827
- [6] Lefebvre P, Movel A, Gallart M, et al. High internal electric field in a graded-width InGaN/GaN quantum well: accurate determination by time-resolved photoluminescence spectroscopy. *Appl Phys Lett*, 2001, 78(9):1252
- [7] Takeuchi T, Wetzl C, Yamaguchi S, et al. Determination of piezoelectric fields in strained GaInN quantum wells using the quantum-confined Stark effect. *Appl Phys Lett*, 1998, 73(12):1691
- [8] Bernardini F, Fiorentini V. Macroscopic polarization and band offsets at nitride heterojunctions. *Phys Rev B*, 1998, 57(16):9427
- [9] Cingolani R, Botchkarev A, Tang H, et al. Spontaneous polarization and piezoelectric field in GaN/Al<sub>0.15</sub>Ga<sub>0.85</sub>N quantum wells; impact on the optical spectra. *Phys Rev B*, 2000, 61(4):2711
- [10] Luo Yi, Guo Wenping, Shao Jiaping, et al. A study on wavelength stability of GaN-based blue light emitting diodes. *Acta Phys Sin*, 2004, 53(8):2720 (in Chinese) [罗毅, 郭文平, 邵嘉平, 等. GaN 基蓝光发光二极管的波长稳定性研究. *物理学报*, 2004, 53(8):2720]
- [11] Waltereit P, Brandt O, Trampert A, et al. Nitride semiconductors free of electrostatic fields for efficient white light-emitting diodes. *Nature (London)*, 2000, 406(6798):865
- [12] Chen C Q, Gaevski M E, Sun W H, et al. GaN homoepitaxy on freestanding (1 $\bar{1}00$ ) oriented GaN substrates. *Appl Phys Lett*, 2004, 81(17):3194
- [13] Ng H M. Molecular-beam epitaxy of GaN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N multiple quantum wells on *R*-plane (10 $\bar{1}2$ ) sapphire substrates. *Appl Phys Lett*, 2002, 80(23):4369
- [14] Craven M D, Lim S H, Wu F, et al. Structural characterization of nonpolar (11 $\bar{2}0$ ) *a*-plane GaN thin films grown on (1 $\bar{1}02$ ) *r*-plane sapphire. *Appl Phys Lett*, 2002, 81(3):469
- [15] Ni X, Fu Y, Moon Y T, et al. Optimization of (11 $\bar{2}0$ ) *a*-plane GaN growth by MOCVD on (1 $\bar{1}02$ ) *r*-plane sapphire. *J Cryst Growth*, 2006, 290:166
- [16] Haskell B A, Wu F, Matsuda S, et al. Structural and morphological characteristics of planar (11 $\bar{2}0$ ) *a*-plane gallium nitride grown by hydride vapor phase epitaxy. *Appl Phys Lett*, 2003, 83(8):1554
- [17] Li D S, Chen H, Yu H B, et al. Effects of carrier gas on the stress of *a*-plane GaN films grown on *r*-plane sapphire substrates by metalorganic chemical vapor deposition. *J Cryst Growth*, 2004, 263:76
- [18] Yu H B, Chen H, Li D S, et al. Photoluminescence study of Si-doped (11 $\bar{2}0$ ) *a*-plane GaN grown on (1 $\bar{1}02$ ) *r*-plane sapphire by metalorganic chemical vapor deposition. *J Cryst Growth*, 2004, 263:94
- [19] Li D S, Chen H, Yu H B, et al. Anisotropy of *a*-plane GaN grown on *r*-plane sapphire by metalorganic chemical vapor deposition. *J Cryst Growth*, 2004, 265:107
- [20] Sasaki T, Zembutsu S. Substrate-orientation dependence of GaN single-crystal films grown by metalorganic vapor-phase epitaxy. *J Appl Phys*, 1987, 61(7):2533
- [21] Haskell B A, Wu F, Craven M D, et al. Defect reduction in (11 $\bar{2}0$ ) *a*-plane gallium nitride via lateral epitaxial overgrowth by hydride vapor-phase epitaxy. *Appl Phys Lett*, 2003, 83(4):644
- [22] Wagner J M, Bechstedt F. Phonon deformation potentials of  $\alpha$ -GaN and  $\alpha$ -AlN: an *ab initio* calculation. *Appl Phys Lett*, 2000, 77(3):346
- [23] Davydov V Y, Averkiev N S, Goncharuk I N, et al. Raman and photoluminescence studies of biaxial strain in GaN epitaxial layers grown on 6H-SiC. *J Appl Phys*, 1997, 82(10):5097

## Growth and Stress Analysis of $a$ -Plane GaN Films Grown on $r$ -Plane Sapphire Substrate with a Two-Step AlN Buffer Layer \*

Yan Jianfeng<sup>†</sup>, Zhang Jie, Guo Liwei, Zhu Xueliang, Peng Mingzeng, Jia Haiqiang, Chen Hong, and Zhou Junming

(Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

**Abstract:**  $a$ -plane GaN films were grown on  $r$ -plane sapphire substrates by metalorganic chemical vapor deposition with a two-step AlN buffer layer. High-resolution X-ray diffraction and micro-Raman scattering were used to analyze the residual strain and crystalline quality of the as-grown samples. The on-axis full width at half maximum value (FWHM) of the X-ray rocking curve is  $0.193^\circ$ , and the FWHM of the  $E_2$ -high energy peak is  $3.9\text{cm}^{-1}$ , indicating that the as-grown sample is of high quality. The orientation of the  $a$ -plane GaN with respect to  $r$ -plane sapphire substrate is confirmed to be  $[11\bar{2}0]_{\text{GaN}} \parallel [1\bar{1}02]_{\text{sapphire}}$ ,  $[0001]_{\text{GaN}} \parallel [\bar{1}101]_{\text{sapphire}}$  and  $[\bar{1}100]_{\text{GaN}} \parallel [11\bar{2}0]_{\text{sapphire}}$ . The residual stress of the  $a$ -plane GaN grown with two-step AlN buffer is different from that of the  $a$ -plane GaN grown with a low-temperature GaN buffer, due to the effects of the AlN buffer, which has a larger thermal mismatch to sapphire than that of GaN.

**Key words:** GaN; non-polar; X-ray diffraction; Raman spectrum; residual stress

**PACC:** 7280E; 6855; 7830

**Article ID:** 0253-4177(2007)10-1562-06

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Nos. 10474126, 10574148), the National High Technology Research and Development Program of China (Nos. 2006AA03A107, 2006AA03A106), and the State Key Development Program for Basic Research of China (No. 2002CB311900)

<sup>†</sup> Corresponding author. Email: jfyanmail@yahoo.com.cn

Received 16 April 2007, revised manuscript received 29 April 2007

©2007 Chinese Institute of Electronics