= НАНОМАТЕРИАЛЫ, = Керамика =

УДК 538.911, 538.975

СТРУКТУРНЫЕ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КВАНТОВЫХ ЯМ С НАНОРАЗМЕРНЫМИ ВСТАВКАМИ InAs В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ In_yAl_{1-y}As/In_xGa_{1-x}As НА ПОДЛОЖКАХ InP

© 2011 г. А. Л. Васильев^{1, 4}, И. С. Васильевский², Г. Б. Галиев³, Р. М. Имамов⁴, Е. А. Климов², М. В. Ковальчук^{1,4}, Д. С. Пономарев², В. В. Роддатис¹, И. А. Субботин^{1,4}

¹Российский научный центр "Курчатовский институт", Москва ²Научно-исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва ³Институт сверхвысокочастотной полупроводниковой электроники РАН, Москва ⁴Институт кристаллографии РАН, Москва E-mail: imamov@ns.crys.ras.ru Поступила в редакцию 21.09.2010 г.

Проведено комплексное исследование влияния введения наноразмерной вставки InAs различной толщины в квантовую яму $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ на электрофизические свойства и структурные особенности наногетероструктур $In_{0.50}Ad_{0.50}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.50}As$ с двусторонним легированием δ -Si, выращенных на подложках InP. Выявлено, что слои наногетероструктур со слабым рассогласованием решетки ориентируются одинаково: куб на кубе. Обнаружено увеличение подвижности при введении наноразмерной вставки InAs. При толщине вставки около 1.8 нм эффект увеличения подвижности насыщается вследствие возрастания дефектности. Установлено выделение второй, по-видимому, вюрцитной фазы, связанное, как и другие дефекты в слоях наногетероструктур, с локальными деформациями, вызванными колебанием содержания индия в слоях.

ВВЕДЕНИЕ

Гетероструктуры, выращенные на основе тройных растворов $In_yAl_{1-y}As/In_xGa_{1-x}As/In_yAl_{1-y}As$, в последние годы вызывают большой научный и практический интерес. В таких гетероструктурах возможно достижение одновременно высоких значений концентрации двумерного электронного газа ($n_s \sim 3.6-5.4 \times 10^{12} \text{ сm}^{-2}$) и подвижности $\mu_e \geq 7000 \text{ сm}^2/(\text{B c})$. Это позволяет создавать CBЧ-приборы с частотами 300–500 ГГц, низкими шумовыми параметрами, высоким значением крутизны транзистора [1–4]. Такие гетероструктуры весьма перспективны для создания полупроводниковых генераторов и детекторов электромагнитного излучения с частотами до 10³ ГГц [5, 6].

Известно, что подвижность электронов в указанных гетероструктурах возможно повышать путем введения тонких слоев (1–5 нм) InAs в квантовую яму (**KЯ**) $In_xGa_{1-x}As$ [7–9]. Увеличение подвижности μ_e зависит от состава KЯ, а также от положения и толщины вставки InAs [8, 10]. В [11] предложена инвертированная модулировано-легированная структура с композитным каналом, содержащим КЯ из InAs толщиной 4 нм в слое $In_xGa_{1-x}As$. Вместе с тем это значение превышает критическую толщину псевдоморфно напряженного слоя, при этом могут возникать дислокации, ухудшающие структурные и электрофизические характеристики. Кроме того, индий является сегрегирующим и реиспаряемым компонентом в твердых pacтворах InAlAs/InGaAs, что могло в ряде исследований приводить к расплыванию наноразмерных вставок InAs. Различие температур роста в различных работах и отсутствие детальных структурных исследований образцов с наноразмерными вставками оставляет открытым вопрос о влиянии наноразмерных вставок с четкими границами раздела на электронные свойства и структурное совершенство слоев. В [7, 12] отмечалось, что насыщение дрейфовой скорости электронов в КЯ In_xGa_{1-x} Аs в сильных электрических полях сопровождается изменением концентрации электронов, причем эти изменения зависят от технологических режимов роста гетероструктуры [13]. Причины этого до сих пор не установлены [14]. В [15, 16] исследовались подобные структуры с композитной КЯ переменного состава $In_xGa_{1-x}As/In_vAl_{1-y}As$, однако детальные структурные исследования не проводились. В случае использования вставок чистого InAs в состав In_{0 53}Ga_{0 47}As, изоморфных подложке InP, рассогласование играет существенную роль. Кроме того, при нанометровой толщине вставки шероховатость границ даже в единицы монослоев вносит заметный вклад во флуктуацию толщины вставки, а значит, сильнее влияет на энергетический спектр носителей тока и на их рассеяние. Поэтому получение и комплексное исследование электрофизических свойств и структурных характеристик гетероструктур, содержащих нанораз-







Рис. 1. Схема слоев гетероструктур.

мерные вставки InAs в KЯ $In_xGa_{1-x}As$, выращенных на подложках InP, является актуальной задачей.

В настоящей работе представлены результаты исследований влияния вставки InAs различной толщины в KЯ $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ на электрофизические и структурные характеристики гетероструктур $In_{0.5}Al_{0.5}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.5}Al_{0.5}As$ с двухсторонним δ -легированием кремнием на подложках InP с буферным слоем $In_{0.50}Al_{0.50}As$.

ОБРАЗЦЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

Образцы для исследования выращены методом молекулярно-лучевой эпитаксии в установке

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ том 56 № 2 2011

ЦНА-24 (Россия) на подложках (100)InP. Технологические условия и режимы роста различных слоев для всех выращенных образцов были одинаковыми. Установка не имеет модуля дифракции быстрых электронов, поэтому калибровка толщины и составов слоев проведена по результатам измерений толщины тестовых эпитаксиальных слоев $In_xGa_{1-x}As$ и $In_yAl_{1-y}As$, что ограничивает точность определения до ~4%.

Для исследований были выращены три образца, показанные схематично на рис. 1а–1в, там же приведены толщины слоев. Кристаллографические характеристики подложки и слоев представлены в табл. 1. Первый слой на подложке – буферный слой In_{0.50}Al_{0.50}As, по составу он близок к

Слой	Слой	Простран- ственная группа	Параметры элементарной ячейки, нм
1	InP	$F\overline{4}3m$	0.58686
2	Al _{0.5} In _{0.5} As	F43m	0.585
3	InAs	F43m	0.60584
4	In _{0.5} Ga _{0.5} As	F43m	0.5856
5	Si	Fd3m	0.543

Таблица 1. Кристаллографические характеристики слоев гетероструктур

изоморфному соединению InP. Для заполнения КЯ электронами в этом слое был сформирован δ -слой Si. После слоя In_{0.50}Al_{0.50}As формировалась КЯ. В образце № 1 она представлена однородным слоем In_{0 53}Ga_{0 47}As без вставки, а в образцах \mathbb{N} 2 и № 3 со вставкой InAs в центре КЯ толщиной 1.8 нм (рис. 1б) и 3.2 нм (рис. 1в) соответственно. При этом суммарная толщина КЯ для всех трех образцов оставалась одинаковой и равнялась 16.8 нм. После КЯ был выращен барьерный слой In_{0.50}Al_{0.50}As, а также легированный кремнием б-слой. Уровень легирования б-слоев кремнием составлял $N_{\rm Si}(\delta_2) = 0.88 \times 10^{12}$ см⁻² и $N_{\rm Si}(\delta_2) = 2.9 \times 10^{12}$ см⁻². Толщины слоев, показанные на рис. 1, определялись из параметров ростового процесса. Сверху на структурах был выращен защитный слой In_{0.53}Ga_{0.47}As, предохраняю-ЩИЙ Al-содержащий барьерный слой OT окисления атмосферным кислородом.

Для анализа влияния наноразмерной вставки InAs в KЯ на электрофизические характеристики образцов были измерены холловская подвижность $\mu_{\rm H}$ и концентрация двумерного электронного газа $n_{\rm H}$ при температурах 300 и 77 К.

Для исследования образцов электронной микроскопией стандартными методами были приготовлены поперечные срезы этих гетероструктур. После механического утончения до толщины 20– 40 мкм следовало утончение Ar⁺ в установке Gatan 691 PIPS (GATAN, США) при ускоряющем напряжении 5 кэВ до образования отверстия. Окончательная полировка осуществлялась ионами с понижением энергии до 0.1 кэВ. Исследование гетероструктур проводилось в просвечивающем растровом электронном микроскопе TITAN 80–300 (FEI, США) с корректором сферической аберрации зонда в режимах светлого и темного поля. В последнем случае при сканировании образца использовался высокоугловой кольцевой детектор рассеянных электронов (HAADF). Ускоряющее напряжение составляло 300 кВ.

Измерения кривых дифракционного отражения проводились на трехкристальном рентгеновском спектрометре TPC-1 (Россия). Кривые дифракционного отражения записывались в квазибездисперсионной схеме в пошаговом режиме сканирования $\theta - 2\theta$. В качестве источника рентгеновского излучения использовалась трубка с медным анодом мощностью 1 кВт. Монохроматизированный пучок формировался высокосовершенным кристаллом-монохроматором Ge (004) и системой коллимационных щелей. Для подавления диффузной составляющей отражения и увеличения соотношения «сигнал/шум» перед детектором устанавливалась узкая щель (0.4 мм).

РЕЗУЛЬТАТЫ ИЗМЕРЕНИЙ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Электронная микроскопия. Изображение образцов № 1–3 в темном поле с малым увеличением представлены на рис. 2а–2в соответственно. В силу большой разницы в составах слоев наблюдается сильный Z-контраст. Слои, имеющие более высокое содержание тяжелых элементов, а это в рассматриваемых образцах – In в области вставки, выглядят светлее. То же относится к контрасту



Рис. 2. Электронно-микроскопическое изображение поперечных срезов гетероструктур с малым увеличением в темном поле: $a - N_2 1$; $b - N_2 2$; $b - N_2 3$.

в слоях $In_yAl_{1-y}As/In_xGa_{1-x}As$, в которых слой $In_xGa_{1-x}As$ с более тяжелыми атомами Ga по сравнению с Al выглядит светлее. Электроннодифракционные исследования показали, что все слои формируются на подложке InP эпитаксиально с ориентацией куб на кубе:

 $(001)_{\text{InP}} \parallel (001)_{\text{InAlAs}} \parallel (001)_{\text{InGaAs}};$

 $(110)_{InP} \parallel (110)_{InAlAs} \parallel (110)_{InGaAs}.$

Изображения всех слоев получены с осью зоны B = [110]. Точные измерения толщины были осуществлены непосредственно по изображениям кристаллической решетки соответствующих слоев гетероструктур подсчетом количества кристаллических плоскостей. Результаты измерений толщин слоев представлены в табл. 2. Измеренные значения удовлетворительно согласуются с технологическими, хотя наблюдается систематическое завышение реальной толщины слоев относительно технологически заложенных. Однако для самого верхнего (защитного) слоя InGaAs измеренная толщина оказалась меньше предполагаемой во всех образцах. Этот побочный эффект скорее всего связан с незначительным (~3 нм) подтравливанием поверхностного слоя при подготовке образцов для электронно-микроскопических исследований.

Характерное темнопольное изображение кристаллической решетки $In_{1-\nu}Al_{\nu}As$ в проекции B == [110] в сканирующем режиме с использованием кольцевого детектора темного поля представлено на рис. За. Модель структуры в этой же проекции показана на рис. 36. На микрофотографии отчетливо видно разделение атомов (dumbells) в плоскостях (111), соответствующее d = 0.146 нм. В некоторых областях заметен эффект поляризации – тяжелые атомы In выглядят как более яркие пятна. Присутствие более легких атомов алюминия в этих же позициях существенно уменьшает этот эффект. Изображение кристаллической решетки InP и модель структуры представлены на рис. Зв и Зг соответственно. В этом случае эффект поляризации выражен существенно сильнее: атом In выглядит значительно ярче атома фосфора, который из-за сравнительно малого значения Z слабо заметен.

Исследование изображений границ раздела подложка (InP)/буфер (In_{0.50}Al_{0.50}As), полученных с высоким разрешением, демонстрирует неровность границ во всех образцах (рис. 4а–4в). В частности, наблюдаются ступени высотой в 0.5–1 параметра элементарной ячейки. Кроме этого, на границе раздела подложка/буферный слой иногда наблюдается тонкая полоса, имеющая светлый контраст, также толщиной в 0.5–1 параметра элементарной ячейки, что, по-видимому, связано с избыточной концентрацией индия. Похожий эффект наблюдался и в [7–12]. Это явле-

Таблица 2. Толщины слоев в образцах, определенные методом $\Pi \Im M(l_{\Im M})$

Образец	Состав	l _{эм} , Å	
1	In _{0.53} Ga _{0.47} As	33 ± 12	
	$In_{0.50}Al_{0.50}As$	200 ± 12	
	δ_2 -Si		
	$In_{0.50}Al_{0.50}As$		
	In _{0.53} Ga _{0.47} As (153 ± 12	
	$In_{0.50}Al_{0.50}As$ (c	2320 ± 20	
	δ_1 -Si		
	$In_{0.50}Al_{0.50}As$ (6		
	Подложка InP		
2	$In_{0.53}Ga_{0.47}As$		25 ± 12
	$In_{0.50}Al_{0.50}As$		200 ± 12
	δ_2 -Si		
	$In_{0.50}Al_{0.50}As$		
	$In_{0.53}Ga_{0.47}As$	КЯ	66 ± 12
	InAs		17 ± 12
	$In_{0.53}Ga_{0.47}As$		68 ± 12
	In _{0.50} Al _{0.50} As (спейсер)		2340 ± 20
	δ_1 -Si		
	$In_{0.50}Al_{0.50}As$ (6		
	Подложка InP		
3	$In_{0.53}Ga_{0.47}As$		33 ± 10
	$In_{0.50}AI_{0.50}As$	200 ± 12	
	δ_2 -S1		
	$In_{0.50}AI_{0.50}As$	(2 + 1)	
	In _{0.53} Ga _{0.47} As	КЯ	63 ± 12
	InAs		32 ± 12
	$In_{0.53}Ga_{0.47}As$	63 ± 12	
	$111_{0.50}$ Al _{0.50} AS (C	2340 ± 20	
	Ino soAlo soAs (6		
	Полложка InP		
подложка ши			

ние скорее всего связано с тем, что отжиг подложки InP перед ростом осуществляется в избыточном потоке мышьяка, в связи с чем фосфор замещается в поверхностном слое мышьяком, который выглядит светлее на ПЭМ-картине. Границы раздела между слоями гетероструктуры также достаточно четкие и имеют такие же поперечные размеры шероховатости, как и на границе раздела подложка/буферный слой, а именно – $(0.5-1)d_{001}$, т.е. половина или целое межплоскостное расстояние (001) соответствующего слоя $In_yAl_{1-y}As$ или $In_xGa_{1-x}As$. Пример ПЭМ-изображения для каждого образца показан на рис. 5а–5в. Эти данные



Рис. 3. а – изображение кристаллической решетки $In_{1-y}Al_yAs$ в проекции B = [110], полученное в сканирующем режиме с использованием кольцевого детектора темного поля; б – модель структуры $In_{1-y}Al_yAs$; в – изображение кристаллической решетки InP; г – модель структуры InP.



Рис. 4. Изображения границы раздела подложка/буферный слой, полученные в сканирующем режиме с использованием кольцевого детектора темного поля в образцах: а – № 1; б – № 2; в – № 3. В образцах № 1 и 2 на границе раздела виден светлый слой толщиной 0.25–0.5 нм с большей концентрацией In.

позволяют судить о высоком качестве наноразмерных вставок InAs.

В большей части гетероструктур концентрация дефектов очень низка, и небольшое несоответствие кристаллических решеток проявляется в тетрагональных искажениях слоев, что соответствует псевдоморфно напряженному режиму эпитаксиального роста. Однако в верхних слоях гетероструктур вблизи границ раздела In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.50}Al_{0.50}As, обнаруживаются дефекты: дислокации, дефекты упаковки, выделения фазы с отличной от матрицы кристаллической решеткой. Наибольшая концентрация дефектов отмечена в образце № 3. Характерные примеры представлены на рис. 6а–6г. На рис. 6а и рис. 6б представлено соответственно светло- и темнопольное изображение дефекта

СТРУКТУРНЫЕ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КВАНТОВЫХ ЯМ



Рис. 5. Изображения квантовых ям, полученные в сканирующем режиме с использованием кольцевого детектора темного поля в образцах: a - N 2; b - N 2; b - N 3.



Рис. 6. а – светлопольное изображение дефекта упаковки вычитания (обозначен большими белыми стрелками); б – темнопольное изображение дефекта упаковки (также обозначен большими белыми стрелками); в – темнопольное изображение 60°-дислокации с нанесенными точками контуром Бюргерса, маленькой стрелкой показана проекция вектора Бюргерса; г – гексагональная фаза вблизи границы раздела.



Рис. 7. а – увеличенное изображение гексагональной фазы на границе раздела, маленькими белыми стрелками показаны светлые пятна, которые принимались за позиции тяжелых атомов; б – позиции тяжелых атомов, полученные из изображения а; в – модель структуры вюрцита в проекции [$11\overline{2}0$]; г – наложение изображения позиции тяжелых атомов на модель структуры вюрцита.

упаковки вычитания, ограниченного двумя частичными 30⁰ дислокациями; на рис. 6в-60°-дислокации с проекцией вектора Бюргерса $\mathbf{B} = a/4$ [112]; на рис. 6г – включения фазы с гексагональной кристаллической решеткой. Появление дефектов упаковки вычитания и дислокаций с оборванной полуплоскостью, направленной вниз (рис. 6в), свидетельствует о том, что ниже этих дефектов расположен слой с меньшим параметром кристаллической решетки. Расположение этого слоя совпадает с положением верхнего слоя δ-Si. Образованию такого слоя может способствовать отжиг поверхности для последующего формирования δ-слоя кремния, когда рост слоя In_{0.50}Al_{0.50}As приостанавливается. При этом возможно реиспарение атомов индия из поверхностного слоя. Дальнейшее возобновление роста слоев In_{0.50}Al_{0.50}As приводит к незначительному локальному обеднению состава In_vAl_{1 – v}As атомами индия. С этим явлением, по-видимому, связано уменьшение параметра решетки в слое $In_vAl_{1-v}As$ в области δ-Si-слоя.

Увеличенное изображение границы раздела с выделением фазы в слое $In_vAl_{1-v}As$, не совпадающей с кубической матрицей, показано на рис. 7а. Ниже границы раздела последовательность слоев в направлении плотной упаковки, а именно в направлении [111], типична для кубической гранецентрированной кристаллической решетки с пр. гр. F43m, т.е. АВСАВС. Выше границы раздела последовательность слоев близка к реализуемой в гексагональной структуре: АВАВАВ. Характерные для тяжелых атомов (предположительно In) светлые пятна показаны на рис. 7а белыми стрелками. Расположение таких пятен, полученное экспериментально из изображения выделения, показано на рис. 76. На рис. 7в показана модель структуры вюрцита в проекции $[11\overline{2}0]$, а на рис. 7г – наложение двух рисунков, демонстрирующих удовлетворительное совпадение позиций тяжелых атомов. На рис. 8а показана двумерная картина фурье-преобразования от гексагональной фазы, полученная при обработке данных рис. 7а, на рис. 86 – расчетная картина электронной дифракции от гексагональной структуры с пр. гр. Р6₃mc,

СТРУКТУРНЫЕ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КВАНТОВЫХ ЯМ



Рис. 8. а – двумерный спектр Фурье от изображения гексагонального выделения; б – расчетная картина электронной дифракции для гексагональной структуры; в – двумерный спектр Фурье от изображения слоя с кубической структурой.



Рис. 9. Изображение границ раздела слоев $In_{0.50}Al_{0.50}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As$ вблизи поверхности в образцах: а – № 1; б – № 2; в – № 3.

также совпадающей с картиной фурье-преобразования. Для сравнения на рис. 8в приведен двумерный спектр Фурье, полученный от части образца с кубической структурой. Таким образом, можно предположить, что выделение имеет гексагональную структуру и ориентационные соотношения кубической и гексагональной фаз следующие:

 $(111)_{\text{Kyd}} \parallel (0001)_{\text{rekc}}; \quad (110)_{\text{Kyd}} \parallel (11\overline{2}0)_{\text{rekc}}.$

Появление этой фазы на границе раздела может быть связано с локальным колебанием состава InAs в тройном твердом растворе вблизи гете-

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ том 56 № 2 2011

рограниц. На состав слоев вблизи гетерограниц влияет как прерывание роста, так и кратковременное колебание потока элементов после открывания заслонок.

Границы раздела слоев $In_{0.50}Al_{0.50}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As$ трех исследуемых образцов и их поверхности показаны на рис. 9а–9в. Эти границы раздела также, как и рассмотренные выше, практически не содержат структурных дефектов – несоответствие параметров кристаллических структур разрешается их тетрагональными искажениями. На поверхностях образцов выявляются неровности высотой в 1–2 параметра кристаллической решетки.



Рис. 10. Кривые дифракционного отражения: а – от образца № 1; б – от образца № 2; в – от образца № 3.

Рентгенодифракционные измерения. Измеренные кривые дифракционного отражения (КДО) от трех образцов представлены на рис. 10. На всех кривых наблюдается осцилляционная картина. Оценка состава буферных слоев InAlAs по угловому положению дополнительного пика на КДО свидетельствует о псевдоморфном росте данных слоев на InP с небольшим рассогласованием параметра решетки. Содержание InAs в буферном слое InAlAs для образца № 1 составило 47.1%; для образцов № 2 и 3 – 48.6%. Осцилляционная картина для образца № 1, являющегося базовой структурой, свидетельствует о высоком структурном качестве выращенных слоев и четкости гетерограниц. Для более подробного анализа влияния дополнительных вставок InAs на качество гетероструктур осуществили теоретическое моделирование кривых дифракционного отражения без учета диффузного рассеяния рентгеновских лучей (рис. 11). При этом за основу взяли модель структуры образца № 1, в которую последовательно вводились слои InAs толщинами 2 (для образца № 2) и 4 нм (для образца № 3) соответственно, а общая толщина квантовой ямы In_xGa_{1-x}As оставалась без изменения. Составы слоев гетероструктуры соответствовали составам аналогичных слоев образца № 1. Наблюдаемая на рис. 10 разница в виде кривых связана только с различием периода их осцилляции. В то же время качественный анализ трех реальных КДО показывает, что при добавлении слоев InAs в КЯ осцилляционная картина ухудшается - амплитуда осцилля-

ций уменьшается. Для более толстой вставки (образец № 3) осцилляции практически исчезают, что свидетельствует об ухудшении структурного качества данного образца. Тем не менее подвижность электронов в нем остается достаточно высокой. КДО, полученная от образца № 2, имеет свои особенности: помимо пиков от подложки InP (основного) и буфера $In_{0.50}Al_{0.50}As$ проявляется дополнительный широкий и слабоинтенсивный пик. Он располагается справа от пика, связанного с дифракционным отражением от буферного слоя. Причиной его появления может быть гексагональная фаза, обнаруженная в ходе электронно-микроскопических исследований (рис. 7а). Повышение концентрации атомов In по отношению к In_xGa_{1-x} As может рассматриваться как дефект, который приводит к эффективному уменьшению параметра решетки в слое буфера. Межплоскостное расстояние гексагональной фазы меньше кубической в этом же направлении.

Анализ КДО для базовой структуры (1) проводился согласно стандартной методики обработки рентгенодифрактометрических данных [17, 18] с учетом точной аппаратной функции прибора [19]. В используемой методике многослойная структура рассматривается как система однородных подслоев, число которых может и не совпадать с числом выращиваемых по технологии слоев. Введение дополнительных слоев необходимо для более детального описания многослойной структуры. Каждый из подслоев характеризуется толщиной *l_i*, параметром кристаллической решетки *a_i* и стати-



Рис. 11. Теоретически смоделированные кривые дифракционного отражения: а – для образца № 1; б, в – для образцов со вставками InAs толщиной 2 и 4 нм соответственно.

ческим фактором Дебая—Валлера *w_i*, который задает степень аморфизации слоя.

$$f_i = \exp(-w_i) = \exp(-\left\langle \left(\mathbf{K}u\right)^2\right\rangle_i), \qquad (1)$$

где **К** — вектор обратной решетки, u — хаотическое смещение атома из регулярной позиции. Внутри каждого подслоя параметры a_i , f_i считаются постоянными.

В общем случае интегральная интенсивность рентгеновского отражения, измеренная в бездисперсионной двухкристальной схеме, складывается из дифракционной и диффузной (некогерентной) составляющих и определяется выражением [20, 21]:

$$I^{(c)}(\boldsymbol{\theta}_{t}, \mathbf{p}) = I_{h}^{D}(\boldsymbol{\theta}_{i}, \mathbf{p}_{D}) + I^{(d)}(\boldsymbol{\theta}_{i}, \mathbf{B}), \qquad (2)$$

где $\mathbf{p} = \{\mathbf{p}_D, \mathbf{B}\}$ – вектор всех искомых параметров.

Интегральная интенсивность дифракционного отражения с учетом точной формы аппаратной функции описывается следующим выражением [22]:

$$I_{h}^{(D)}(\theta_{i}, \mathbf{p}_{D}) = \frac{I_{0}}{A_{m}^{(\pi)} + A_{m}^{(\sigma)}} \sum_{\eta = \pi, \sigma} A_{hm}^{(\eta)}(\theta_{i}, \mathbf{p}_{D}), \qquad (3)$$

где I_0 – интегральная интенсивность отраженного от монохроматора излучения, η – поляризация

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ том 56 № 2 2011

$$A_{hm}^{(\eta)}(\boldsymbol{\theta}_i, \mathbf{p}_D) = \int_{-\infty}^{\infty} d\boldsymbol{\theta} G_m^{(\eta)}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\omega}_0) P_h^{(\eta)}(\boldsymbol{\theta}_i + \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\omega}_0, \mathbf{p}_D) \quad (4)$$

И

$$A_m^{(\eta)} = \int_{-\infty}^{\infty} d\theta G_m^{(\eta)}(\theta, \omega_0), \qquad (5)$$

которые определяются точной аппаратной функцией двухкристального рентгеновского дифрактометра для бездисперсионной схемы измерений.

Особенностью используемой методики анализа КДО является также учет диффузного рассеяния, обусловленного несколькими причинами: во-первых, это тепловое диффузное рассеяние и рассеяние на дефектах кристаллической решетки как подложки, так и выращенной гетероструктры; во-вторых, рассеяние на шероховатостях границ. Диффузное рассеяние от гетероструктур определяется в основном структурными дефектами в подложке и в отличие от дифракционного не является когерентным. Поэтому угловая зависимость диффузного рассеяния не имеет осциллирующего характера, так что его можно аппроксимировать кусочно-гладкой функцией типа

Таблица 3. Параметры структуры образца "1" по данным рентгеновской дифрактометрии

i	$l_i, Å$	$\Delta a/a, \%$	f_i
1	96.0 (5.7)	0.104 (0.041)	0.489 (0.020)
2	173.0 (3.9)	-0.471 (0.019)	0.441 (0.019)
3	16.5 (3.9)	-0.604 (0.326)	1.000 (0.000)
4	171.5 (6.3)	0.301 (0.011)	0.660 (0.022)
5	74.0 (20.2)	-0.289 (0.023)	0.531 (0.022)
6	2322.0 (20.9)	-0.325 (0.001)	0.567 (0.004)
7	буфер	0.581 (0.013)	

Таблица 4. Электрофизические параметры исследуемых образцов: $n_{\rm H}$ и $\mu_{\rm H}$ — холловские концентрация и подвижность электронов

Образец	T = 300 K		T = 77 K	
	$n_{\rm H}, \\ \times 10^{12} {\rm cm}^2$	$\mu_{\rm H}, \ {\rm cm^2/(Bc)}$	$n_{\rm H}, \\ \times 10^{12} {\rm cm}^2$	μ _H , см ² /(В с)
1	3.65	10298	3.39	29 593
2	2.67	11448	2.92	31693
3	2.5	12934	2.85	31808

$$I^{(d)}(\theta_i, \mathbf{B}) = B_j + (B_{j+1} - B_j) \frac{\theta_i - \tilde{\theta}_j}{\tilde{\theta}_{j+1} - \tilde{\theta}_j},$$
(6)

где $\theta_i \in (\tilde{\theta}_j, \tilde{\theta}_{j+1})$, а угловые интервалы $(\tilde{\theta}_j, \tilde{\theta}_{j+1})$, на которых функция $I^{(D)}$ имеет непрерывную производную, должны быть намного больше, чем периоды осцилляций, наблюдаемые на кривой отражения. Коэффициенты B_j являются варьируемыми параметрами.

На основании вышеперечисленных формул проводится подгонка теоретических КДО к экспериментальным с использованием метода χ^2 [23], согласно которому искомые параметры находятся с помощью минимизации функционала

$$\chi^{2} = \frac{1}{N - N_{p}} \sum_{i=1}^{N} \frac{(I_{i}^{\exp} - I_{i}^{th})^{2}}{\sigma_{i}^{2}},$$
(7)

где N – число точек на КДО, N_p – число искомых параметров, I_i^{exp} и I_i^{th} – измеряемая и рассчитанная интенсивности отраженной волны соответственно, σ_i – статистическая ошибка измерений, определяемая общим счетом на детекторе в соответствии с законом Пуассона

$$\sigma_i = \sqrt{I_i^{exp}/t_i k_i} \,. \tag{8}$$

Здесь t_i — время измерения, k_i — коэффициент ослабления за счет введения дополнительного поглотителя.

Электрофизические свойства. В табл. 4 представлены результаты измерения концентрации и холловской подвижности электронов в образцах при температурах 300 и 77 К. Как видно, образцы имеют высокую подвижность электронов, соответствующую наблюдаемым значениям в аналогичных исследованиях [24]. При низких температурах подвижность в каждом образце существенно возрастает. Это свидетельствует о том, что доминирующим механизмом рассеяния является рассеяние электронов на фононах. В случае значительного рассогласования параметров решетки слоев наблюдается меньшее значение подвижности и ее слабое увеличение при понижении температуры [25].

Исследования показали, что введение вставки InAs толщиной ~1.8 нм (образец № 2) сопровождается увеличением подвижности электронов и уменьшением холловской концентрации электронов $n_{\rm H}$. Эта тенденция сохраняется и при почти двукратном увеличении толщины слоя InAs (образец № 3). Как видно из табл. 4, для этого образца увеличение подвижности электронов по сравнению с образцом № 2 менее выражено, чем увеличение подвижности в образце № 2 по сравнению с опорным образцом № 1 без вставки. В особенности замедляется возрастание подвижности при низкой температуре (77 К). Так, µ_н в образце № 3 ненамного превышает подвижность в образце № 2. Это свидетельствует о том, что происходит насыщение эффекта увеличения подвижности электронов при увеличении толщины вставки InAs. При приближении ко времени релаксации импульса электронов их подвижность $\mu = e\tau/m^*$. С одной стороны, возрастание подвижности объясняется уменьшением эффективной массы электронов *m** в композитной КЯ, образованной слоями $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ и вставкой InAs. С другой стороны, введение вставки способствует возникновению дополнительных механизмов рассеяния, сокращающих время релаксации импульса т. Это может быть как рассеяние на шероховатостях (неоднородностях) гетерограниц, так и рассеяние на протяженных дислокациях и массивах дефектов.

Как показывают структурные исследования, гетерограницы вставки InAs и KЯ во всех образцах достаточно гладкие. Шероховатость порядка 0.5 монослоя составляет ~20% от средней толщины вставки в образце № 2. В образце № 3 вклад в рассеяние электронов за счет шероховатостей границ еще меньше из-за большей толщины вставки. Следовательно, основной причиной насыщения роста подвижности является подключе-

ние механизма рассеяния на дислокациях. Для данных условий роста толщина вставки 3.2 нм оказалась близкой к критической толщине [26], выше которой начинается процесс релаксации упругих напряжений с образованием дислокаций. Это согласуется с наблюдаемым эффектом размытия побочных максимумов на рентгенодифракционной картине и с данными электронной микроскопии. Тем не менее такое несовершенство образца компенсируется уменьшением эффективной массы в композитной КЯ, вследствие чего подвижность электронов остается высокой.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработана технология формирования методом молекулярно-лучевой эпитаксии гетероструктур $In_{0.5}Al_{0.5}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.5}Al_{0.5}As$ с наноразмерными вставками InAs с четкими границами раздела.

Гетероструктуры исследованы на атомном уровне совместно методами просвечивающей электронной микроскопии и рентгеновской дифрактометрии. Эпитаксиальные слои гетероструктур ориентированы одинаково (куб на кубе). На большинстве границ раздела дислокации несоответствий не обнаружено: не большое несоответствие параметра решетки разрешается через тетрагональные искажения при псевдоморфном механизме роста слоев.

Показано, что введение вставки InAs в центр квантовой ямы позволяет увеличить подвижность электронов при комнатной температуре более чем на 25% при толщине вставки от 1 до 3 нм вследствие уменьшения эффективной массы электронов в композитной квантовой яме. Однако при толщине вставки около 3 нм наблюдается насыщение, связанное с превышением критической толщины слоя и ростом рассеяния на дислокациях.

Дефекты, наблюдаемые методами электронной микроскопии в верхних слоях гетероструктуры (дефекты упаковки вычитания, 60°-дислокации, выделения второй фазы), могут быть связаны с локальными деформациями кристаллической решетки слоев, вызванными колебанием содержания индия, что подтверждается и рентгенодифракционными исследованиями.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 27 "Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов", проекта НК-616Р(39) и Ведущей научной школы НШ-65.636.2010.2.

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ том 56 № 2 2011

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. *Yamashita Y., Endon A. et al.* // IEEE Electron Dev. Lett. 2002. V. 23. № 10. P. 573.
- Wallart X., Pinsard B., Mollot F. // J. Appl. Phys. 2005. V. 97. P. 053706.
- 3. *Huang J., Hsu W. et al.* // Semicond. Sci. Technol. 2006. V. 21. P. 619.
- 4. *Chen Y., Hsu W. et al.* // Solid State Elect. 2004. V. 48. P. 119.
- Stillman W.J., Shur M.S. // J. Nanoelectron. Optoelectron. 2007. V. 2. P. 209.
- Dyakonova N., Lukasowski J. et al. // Appl. Phys. Lett. 2006. V. 88. P. 141906.
- 7. Xu D., Kraus S. A. et al. // IEEE Trans. Electron. Dev. 1998. V. 45. P. 21.
- Akazaki T., Arai K., Enoki T. et al. // IEEE Electron Dev. Lett. 1992. V. 13. P. 325.
- 9. *Maeda N., Ito H. et al.* // Appl. Phys. 1997. V. 81. № 3. P. 1552.
- Sexl M., Bohm G., Xu D. et al. // J. Cryst Growt. 1997. V. 175/176. P. 915.
- 11. Akazaki T., Nina J., Takayanagi H. // Appl. Phys. Lett. 1994. V. 65. № 10. P. 1263.
- Hong W.P., Bhattacharya P.K. // IEEE Trans. Electron. Dev. 1987. V. 34. P. 1491.
- Peiro F., Ferrer J.C., Cornet A. et al. // J. Vac. Sci. Technol. 1997. V. 15. № 5. P. 1715.
- 14. *Орлов М.Л., Орлов Л.К.* // Физика и техника полупроводников. 2009. Т. 43. С. 679.
- 15. *Kim T.W., Jung M., Lee D.U. et al.* // J. Appl. Phys. 1997. V. 82. № 9. P. 4388.
- Kim T.W., Jung M. // Solid State Commun. 1999. V. 109. p. 483.
- 17. Афанасьев А.М., Чуев М.А., Имамов Р.М. и др. // Кристаллография. 1997. Т. 42. № 3. С. 514.
- 18. *Афанасьев А.М., Имамов Р.М.* // Кристаллография. 2003. Т. 48. № 5. С. 799.
- Пашаев Э.М., Субботин И.А., Чуев М.А. и др. // Приборы и техника эксперимента. 2009. № 5. С. 107.
- 20. Афанасьев А.М., Чуев М.А., Имамов Р.М. и др. // Кристаллография. 2001. Т. 46. № 5. С. 581.
- 21. Афанасьев А.М., Чуев М.А., Имамов Р.М. и др. // Письма в ЖЭТФ. 2001. Т. 74. № 10. С. 560.
- 22. Чуев М.А., Пашаев Э.М., Квардаков В.В. и др. // Кристаллография. 2008. Т. 53. № 5. С. 808.
- 23. Идье В., Драйард Д., Джеймс Ф. и др. // Статистические методы в экспериментальной физике. М.: Атомиздат, 1976. 334 с.
- 24. *Roh D.-W., Lee H.G., Lee D-W.* // J. Cryst. Growth 1996. V. 167. P. 468.
- 25. Васильевский И.С., Галиев Г.Б., Мокеров В.Г. и др. // Кристаллография. Т. 55. № 1. С. 7.
- 26. Matthews J.W., Blakeslee A.E. // J. Cryst. Growth. 1974. V. 118. P. 27.