

**А.А. Малджы,
Р.Х. Акчурин,
*А.А. Мармалюк
*ООО «Сигм Плюс»**

РАСЧЁТ УСТОЙЧИВОСТИ МНОГОСЛОЙНЫХ КВАНТОВОРАЗМЕРНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР InGaAs/GaAs К ВЕРОЯТНОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ НЕСООТВЕТСТВИЯ

УДК: 621.315.5:548.55

Определены области стабильности, метастабильности и неустойчивости многослойных квантоворазмерных гетероструктур (ГС) InGaAs/GaAs к образованию дислокаций несоответствия (ДН). Установлен характер распределения напряжений в исследуемых образцах. Построены графики, позволяющие наглядно проследить изменение избыточных напряжений в квантовых ямах и барьерах.

Введение

В последние годы интенсивно развиваются направления, связанные с получением низкоразмерных ГС, в которых проявляются квантово-размерные эффекты. Примером использования таких ГС являются лазерные диоды, ИК-фотоприёмники на основе множественных квантовых ям, транзисторы с высокой подвижностью электронов.

Одной из наиболее применяемых структур для вышеперечисленных приборов является ГС InGaAs/GaAs. Активные элементы такой структуры представляют собой полупроводниковые кристаллы, размеры которых в одном из направлений составляют не более 10 нм. Как правило, формирование таких элементов происходит на подложках, имеющих параметр ячейки, отличный от параметра ячейки осаждаемого материала. Это несоответствие приводит к возникновению упругих напряжений. Энергия деформаций, накапливающихся в плёнке, пропорциональна её толщине. После того, как толщина слоя начинает превосходить некоторую величину, называемую критической, на границе раздела могут образовываться дислокации несоответствия (ДН), оказывающие негативное влияние на свойства ГС (ухудшение транспорта носителей,

введение дополнительных оптических потерь, появление новых каналов токовых утечек). Определению критических условий генерации ДН посвящено большое количество работ (например, [1-4]). Модель, описанная в [2], является одной из наиболее часто используемых. Однако поскольку она была разработана применительно к простым (однослойным) ГС, ее использование для более сложных (многослойных) ГС ограничено.

Широкое распространение многослойных квантоворазмерных ГС вызвало необходимость развития подходов, позволяющих оценивать их устойчивость к образованию ДН. Авторами [5-8] предприняты попытки разработки соответствующего метода расчета, однако следует отметить, что общепризнанно надёжной модели до сих пор не существует.

В данной работе на основе модели [5, 6] и с использованием экспериментальных результатов определены критерии, позволяющие оценить границы устойчивости многослойной квантоворазмерной ГС InGaAs/GaAs к генерации ДН.

Объекты исследования

В работе исследовались квантоворазмерные ГС $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$, выращенные методом МОС-гидридной эпитаксии. Рост осуществлялся при температуре 740°C и давлении $8 \cdot 10^3$ Па в горизонтальном кварцевом реакторе с вращающимся графитовым подложкодержателем.

В качестве источников элементов III и V групп использовались $\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$, $\text{In}(\text{CH}_3)_3$ и AsH_3 , в качестве газа-носителя - водород. Эпитаксиальный рост проводился на подложках n-GaAs (100). В табл. 1 представлены характеристики изучаемых образцов.

Таблица 1. Характеристики ГС $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}/\text{GaAs}$.

Образец	Количество квантовых ям	Толщина квантовой ямы (Å)	Толщина барьерного слоя (Å)	Толщина прикрывающего слоя (Å)
D-67	5	80	100	130+500=630
D-69	2	80	100	130+500=630
D-70	5	80	200	130+500=630
D-71	5	70	300	300+1500=1800
D-72	5	70	200	200+2000=2200
D-73	6	70	200	200+2000=2200

Результаты расчёта и их обсуждение

Для определения критических толщин образования ДН в ГС с одиночной квантовой ямой использовалась наиболее освещённая в литературе модель [2]. Расчёт проводился по уравнению:

$$h_c = \frac{b}{k2\pi\epsilon} \frac{(1-\nu)\cos^2\alpha}{(1+\nu)\sin\lambda} \left(\ln \frac{\beta h_c}{b} + 1 \right) \quad (1)$$

где $b = a_{\text{InGaAs}}/\sqrt{2}$ – величина вектора Бюргерса дислокации; $\alpha = 60^\circ$ – угол между вектором Бюргерса и линией дислокации; $\lambda = 60^\circ$ – угол между вектором Бюргерса и лежащим в плоскости границы раздела перпендикуляром к пересечению плоскости скольжения дислокации и поверхности подложки; β – параметр ядра дислокации (для рассматриваемого случая $\beta=4$ [5]); $\nu=0.3$ – коэффициент Пуассона для InGaAs ; ϵ – двумерная (плоская) упругая деформация в плёнке ($\epsilon=(a_{\text{InGaAs}} - a_{\text{GaAs}})/a_{\text{GaAs}}$); $k=2$ для одиночной квантовой ямы [5].

На рис. 1 представлена расчетная зависимость критической толщины образования ДН от состава эпитаксиального слоя (ЭС) в ГС $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Площадь, расположенная ниже расчетной кривой, соответствует разрешенной области (без ДН), а выше – метастабильной (вероятность образования ДН значительна).

Из литературы известно об экспериментах, в которых были выращены ГС с низкой плотностью структурных дефектов в метастабильной области [4, 9]. Как правило, все эти структуры выращивались при пониженной температуре и не подвергались длительному высокотемпературному отжигу. Возможность получения подобных результатов обусловлена кинетикой развития процесса

дефектообразования. Как было показано в [5], развитию дефектов препятствуют «тормозящие» силы. Длительный отжиг при высокой температуре способствует преодолению этих «тормозящих» сил и приводит к резкому повышению плотности ДН для ГС в метастабильной области.

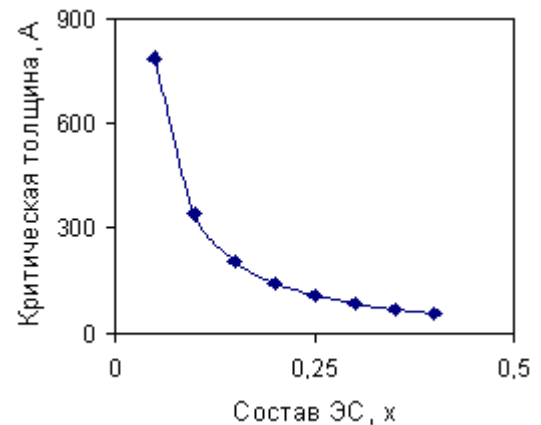


Рис. 1. Зависимость критической толщины образования ДН от состава ЭС $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, рассчитанная по модели [1].

Для оценки стабильности или метастабильности напряжённой многослойной ГС принимается такой параметр, как «избыточное напряжение», предложенный в [5, 6].

Избыточное напряжение – это разница между напряжением, вызванным несоответствием параметров решётки, и напряжением, приводящим к образованию ДН. Оно зависит от одного из двух механизмов релаксации упругих напряжений: 1 – ДН вводятся на границе раздела между подложкой и напряженным слоем и проходят через всю структуру до поверхности (одинарные дислокационные петли); 2 – ДН образуются на верхней и нижней границах напряженного слоя (двойные

дислокационные петли). Первый механизм преобладает в структурах с толщинами верхнего прикрывающего слоя не более 200-400 Å. Для рассматриваемых в данной работе ГС толщина прикрывающего слоя существенно превышает данные

величины. Поэтому расчёт избыточных напряжений проводился по уравнению (2), соответствующему механизму релаксации напряженных слоев через образование двойной дислокационной петли [6].

$$\sigma_{exe}^{DK}(z > 2h) = \left| 2\mu \left(\frac{1+\nu}{1-\nu} \right) \int_{z-h}^z e(z') z' \frac{dz'}{h} \right| - \frac{\mu}{\pi} \left(\frac{1-\nu \cos^2 \alpha}{1-\nu} \right) \frac{\ln(4h/b)}{h/b} \quad (2)$$

где μ - модуль сдвига, ν - коэффициент Пуассона, h - толщина слоя, z - суммарная толщина структуры, $\int_{z-h}^z e(z') dz'/h$ - усреднённое напряжение структуры между z и $z-h$, $b = a_{\text{InGaAs}}/\sqrt{2}$ - величина вектора Бюргерса дислокации, $\alpha = 60^\circ$ - угол между вектором Бюргерса и линией дислокации.

Если избыточное напряжение в любой точке структуры превышает нулевое значение, то структура термодинамически неустойчива. Следовательно, степень, на которую избыточное напряжение превышает нулевое значение на некоторой толщине ГС, это и есть движущая сила для образования ДН. Важная особенность используемого в этой модели подхода состоит в возможности исследования ГС с

напряженными слоями произвольной геометрии и переменного состава.

На основании модели [5, 6] были определены области стабильности, метастабильности и нестабильности каждого из исследуемых образцов к образованию ДН. Построены графики, иллюстрирующие изменение избыточных напряжений в процессе роста квантовых ям и барьеров (рис. 2).

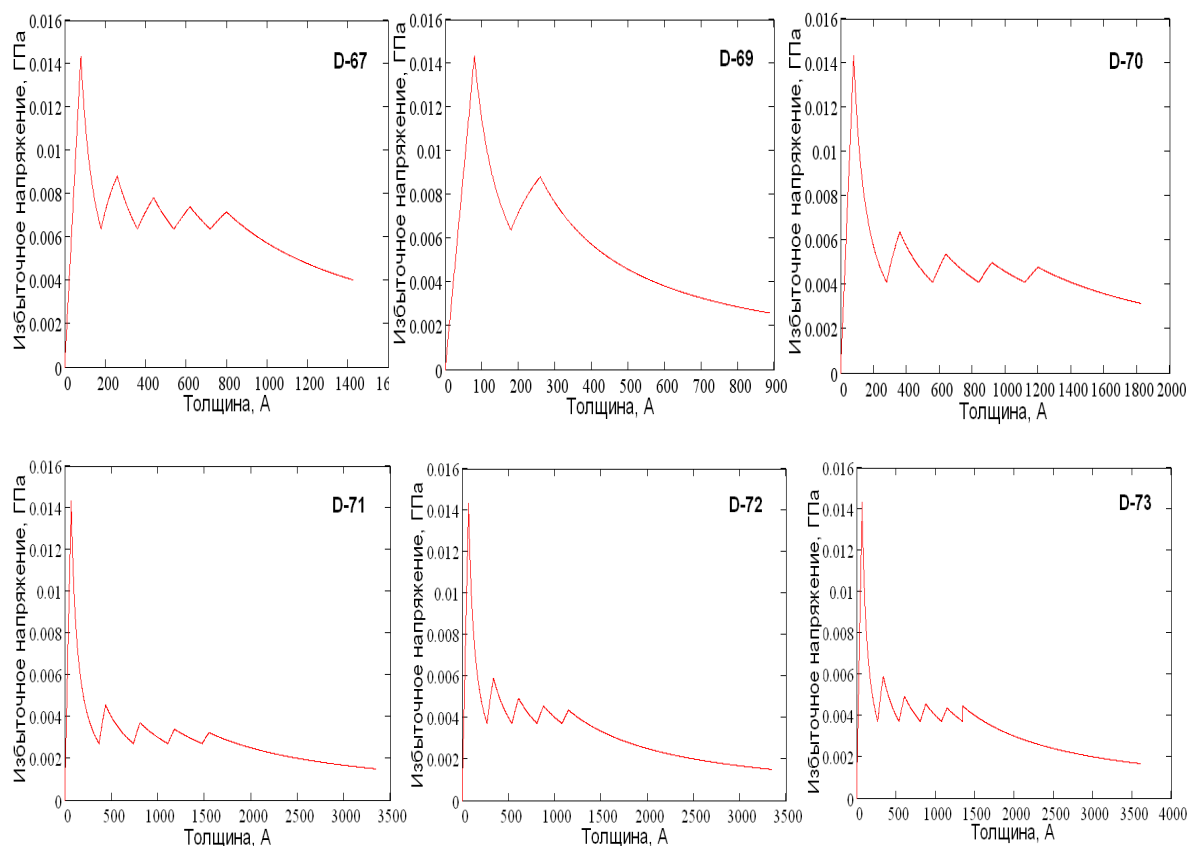


Рис. 2. Расчётное распределение избыточных напряжений по толщине ГС $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ для исследованных образцов.

Для определения устойчивости структуры $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ к образованию ДН зависимости изменения избыточных напряжений от толщины ГС были совмещены с кривыми, ограничивающими стабильную, метастабильную и нестабильную области (рис. 3). Критерием отнесения ГС к одной из указанных групп является значение избыточного напряжения. Границе первой и второй области соответствует его нулевое значение, значение избыточного напряжения, отделяющего «разрешенную» метастабильную область от «запрещенной» составляет

$$0.01 \cdot \mu_{\text{GaAs}}.$$

Пригодность ГС $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ к использованию в производстве полупроводниковых лазеров и суперлюминесцентных диодов определялась по результатам фотолюминесцентных измерений. Измерение спектров фотолюминесценции (ФЛ) проводилось на установке LAMBSCAN, в качестве источника накачки использовался лазер He-Ne. Регистрация излучения проводилась с помощью встроенного монохроматора. Результаты измерений представлены в табл. 2.

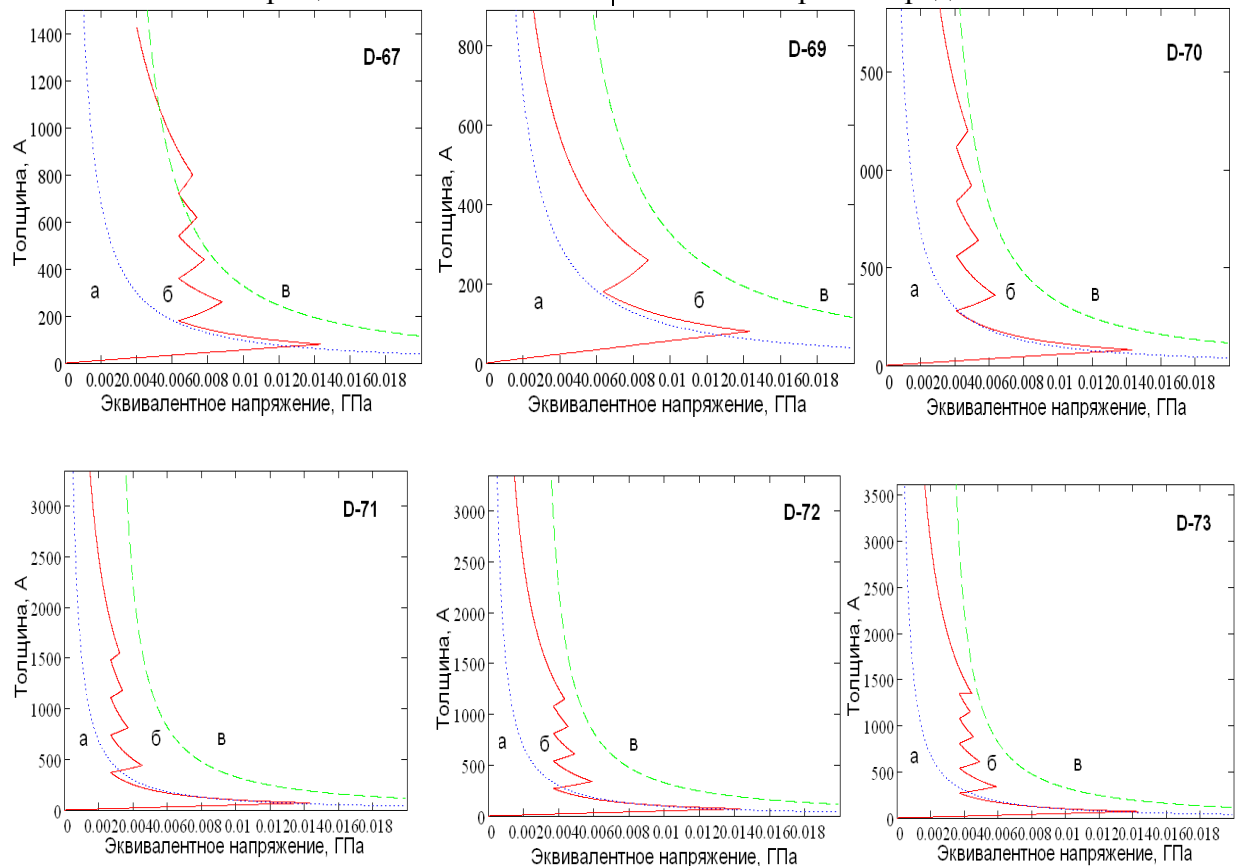


Рис. 3. Результаты расчётной оценки устойчивости ГС $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ к образованию ДН для исследованных образцов (1 и 2 – кривые, разделяющие области стабильности и метастабильности, и область метастабильности и нестабильности, соответственно; а, б, в – области стабильности, метастабильности и нестабильности, соответственно).

Таблица. 2. Интенсивности ФЛ исследуемых образцов.

Образец	Интенсивность ФЛ, отн.ед.
D-67	0.1
D-69	1
D-70	1.03-1.05
D-71	1.35
D-72	1.2
D-73	0.5

Сопоставление данных по интенсивности ФЛ с результатами расчётов по характеру распределения напряжений в указанных ГС показывает отчётливую связь между расчетными и экспериментальными данными. Так, максимальная интенсивность ФЛ наблюдалась в образце D-71. На рис. 3 можно проследить, насколько значения напряжений для данного образца близки к области стабильности ГС к образованию ДН. Видно, что значения напряжений приближены к области стабильности. Напротив, для образцов с максимально удалёнными от области стабильности кривыми распределения напряжений наблюдаются низкие показатели интенсивности ФЛ. Например, в образце

D-67 уже во время роста второй квантовой ямы напряжения превысили критические значения, и структура оказалась нестабильной к образованию ДН. Для этого образца, как видно из табл. 2, наблюдалась минимальная интенсивность ФЛ. Очевидно, что причиной низкой эффективности излучения для этого образца может быть образование ДН в активных слоях. Таким образом, данные расчёта напряжений в рассмотренных образцах показывают отчётливую связь с экспериментальными данными по интенсивности ФЛ и свидетельствуют о возможности применения модели [5, 6] для расчёта устойчивости многослойных квантоворазмерных ГС InGaAs/GaAs к генерации ДН.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Matthews J. W. //J. vac. sci. technol. – 1975. – V. 12. – P. 126.
2. Matthews J.W., Blakeslee A.E. //J. cryst. Growth. – 1974. – V. 27. – P. 118.
3. Frank F.C., Van der Merwe J. H. //Proc. roy. soc. london ser. – 1949. – V. 198. – P. 205.
4. People R. Bean J. C. //Appl. phys. lett. – 1985. – V. 47 – P. 322.
5. Tsao J. Y., Dodson B. W., Picraux S. T., Cornelison D. M. //Phys. rev. lett. –1987. –V. 59 – P. 2455.
6. Tsao J. Y., Dodson B. W. //Appl. phys. lett. – 1988. – V. 53. – P. 848.
7. Houghton D. C. et al. //Appl. phys. lett. – 1990. – V. 68. – P. 1850.
8. Fisher A., Kuhne H., Eichler M., Hollander F., Richter H. //Phys. rev. B. – 1996. – V.54. – P. 8761.
9. Bai G. et al. //Appl. phys. lett. – 1994. – V. 75 – 4475.