

# Снижение плотности дислокаций в метаморфных гетероструктурах путем оптимизации конструкции буферного слоя с нелинейным профилем изменением состава

© М.Ю. Чернов, В.А. Соловьев, С.В. Иванов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: chernov@beam.ioffe.ru

Поступила в Редакцию 26 апреля 2023 г.

В окончательной редакции 2 мая 2023 г.

Принята к публикации 2 мая 2023 г.

Проведены расчеты равновесного распределения плотности дислокаций несоответствия вдоль направления эпитаксиального роста метаморфного буферного слоя  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  с максимальным содержанием  $\text{In}$   $x_{\max} \geq 0.77$  и различными нелинейными профилями изменения состава вида  $x \propto z^{1/n}$ . На примере „корневого“ ( $n = 2$ ) буферного слоя  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  рассмотрено влияние начального состава буфера ( $x_{\min}$ ) на плотность дислокаций несоответствия и величину остаточных напряжений в его верхней части. Показано, что перед упруго растянутым слоем  $\text{GaAs}$  толщиной 1–10 нм, вставленным в метаморфный буферный слой  $\text{InAlAs}$ , формируется свободная от дислокаций область, что согласуется с экспериментальными данными, полученными ранее для ряда метаморфных гетероструктур методом просвечивающей электронной микроскопии. Предложен нелинейный профиль изменения состава метаморфного буферного слоя, позволяющий получать вдвое меньшую плотность дислокаций, чем корневой профиль. Кроме того, представлены результаты расчетов равновесного распределения плотности дислокаций несоответствия по толщине метаморфных транзисторных гетероструктур с высокой подвижностью электронов в двумерном канале, содержащих метаморфный буферный слой  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  различной конструкции и двумерный электронный канал  $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{As}/\text{In}_{0.75}\text{Al}_{0.25}\text{As}$ . В случае использования в транзисторных гетероструктурах с высокой подвижностью электронов в двумерном канале метаморфного буферного слоя с корневым и оптимизированным профилем изменения состава установлены значения обратной ступени, представляющей собой разницу между конечным составом буфера  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  и составом слоя-виртуальной подложки  $\text{In}_{0.75}\text{Al}_{0.25}\text{As}$ , при которых релаксация упругих напряжений в двумерном электронном канале  $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{As}/\text{In}_{0.75}\text{Al}_{0.25}\text{As}$  отсутствует.

**Ключевые слова:** метаморфные гетероструктуры, метаморфный буферный слой, дислокации несоответствия, упругие напряжения,  $\text{In}(\text{Ga},\text{Al})\text{As}/\text{GaAs}$ .

DOI: 10.21883/FTP.2023.03.55627.4915

## 1. Введение

Значительный интерес к разработке полупроводниковых приборов современной электроники на основе твердых растворов  $\text{In}_x(\text{Ga},\text{Al})_{1-x}\text{As}$  с высоким содержанием  $\text{In}$  ( $x \geq 0.7$ ), включая транзисторы с высокой подвижностью электронов (НЕМТ) [1], биполярные транзисторы на гетеропереходах [2], а также полупроводниковые светодиоды и лазеры, излучающие в среднем инфракрасном диапазоне (2–5 мкм) [3], в последнее время усилился благодаря возможностям реализации таких гетероструктур на подложках  $\text{GaAs}$ , которые отличаются высокой технологичностью и низкой стоимостью по сравнению с традиционно используемыми подложками  $\text{InAs}$ ,  $\text{InSb}$  и  $\text{GaSb}$ . При этом возникающая в гетероструктурах высокая плотность дислокаций несоответствия (ДН) и связанных с ними так называемых прорастающих дислокаций (ПД), обусловленная сильным рассогласованием параметров кристаллической решетки подложки ( $a_s$ )  $\text{GaAs}$  и активной области ( $a$ )  $\Delta a/a > 5\%$ , оказывает негативное влияние на выходные параметры приборных структур, а также приводит к их деградации.

За последние несколько лет были развиты различные методы для получения полупроводниковых гетероструктур с приемлемой плотностью дефектов на сильно рассогласованных по параметру решетки подложках. В частности, к таким методам относятся склеивание подложек (*wafer bonding*) [4], эпитаксия на структурированных подложках (*patterned substrates*) [5], а также метаморфная технология [3]. Все подходы, за исключением последнего, включают предварительную обработку подложек с использованием механических, химических и других методов перед началом эпитаксиального роста, что существенно усложняет реализацию гетероструктур на их основе, поэтому с технологической точки зрения метаморфный подход является более предпочтительным.

Ключевым элементом метаморфной технологии является метаморфный буферный слой (МБС). Начиная с 60-х годов широкое распространение получили МБС с градиентом состава вдоль оси роста [6]. Было установлено, что МБС с монотонно изменяющимся составом содержит в верхней части область, практически свободную от дислокаций, толщиной  $d_{\text{free}}$ , в которой аккумулируются остаточные упругие механические напряжения [7].

При этом в остальной части МБС в силу сильного рассогласования параметров решетки подложки и растущего слоя происходит релаксация упругих напряжений путем образования сетки ДН. Остаточные напряжения, аккумулированные в верхней части МБС, обычно компенсируются за счет обратной ступени ( $\Delta$ ), которая представляет собой разницу между конечным составом МБС и составом виртуальной подложки (ВП) — слоя, выращиваемого поверх МБС.

Следует отметить, что от выбора градиента состава МБС сильно зависит распределение плотности дислокаций по его толщине. На сегодняшний день традиционно в метаморфных гетероструктурах используются МБС с линейным [8,9] или ступенчатым [10,11] профилем изменения состава благодаря их относительно простой технологической реализации. Тем не менее, согласно нескольким теоретическим [12–14] и экспериментальным работам [15,16], МБС с нелинейным профилем позволяют получать бездислокационную область большей толщины, а также меньшую плотность дислокаций, чем МБС с линейным или ступенчатым градиентом. В частности, ранее нами было экспериментально показано, что использование в метаморфных гетероструктурах  $\text{In}(\text{As,Sb})/\text{In}(\text{Ga,Al})\text{As}/\text{GaAs}$  МБС  $\text{InAlAs}$  с корневым профилем изменения состава позволяет снизить плотность дислокаций почти на порядок величины по сравнению с МБС с линейным градиентом состава [16]. Однако поиск оптимального профиля изменения состава МБС с целью получения на его основе метаморфных гетероструктур с минимально возможной плотностью дефектов остается актуальной задачей и на сегодняшний день.

Данная работа посвящена оптимизации конструкции МБС  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  ( $x_{\max} \geq 0.77$ ), включая профиль и границы изменения состава, путем численного моделирования распределения плотности ДН в рамках энергетической модели [17] вдоль направления эпитаксиального роста МБС с целью достижения минимально возможной плотности ДН в верхней части МБС и в слоях, выращиваемых поверх него, а также сравнению результатов расчетов с ранее полученными экспериментальными данными. Кроме того, были проведены расчеты равновесного распределения плотности ДН по толщине метаморфных НЕМТ-гетероструктур с двумерным электронным каналом  $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{As}/\text{In}_{0.75}\text{Al}_{0.25}\text{As}$ , содержащих МБС  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  различной конструкции.

## 2. Методика расчета распределения плотности дислокаций несоответствия в МБС

Численный метод расчета в рамках энергетической модели основан на итерационном поиске минимального значения полной энергии системы [17]. МБС или гетероструктура на его основе толщиной  $L$  разбиваются на  $N$  подслоев. Полная энергия системы, включающая в себя упругую энергию ( $E_\varepsilon$ ) и энергию ДН ( $E_d$ ) — первое

и второе слагаемое в формуле (1) соответственно, вычислялась следующим образом:

$$E = \sum_{i=1}^N \varepsilon^2[i] \cdot Y[i] \cdot h + \sum_{i=1}^N K[i] \cdot \rho[i] \cdot h, \quad (1)$$

где  $h$  — шаг расчетной сетки,  $Y$  — модуль Юнга,  $\rho$  — плотность ДН,  $\varepsilon$  — упругие напряжения,  $K$  — коэффициент, выраженный через модуль сдвига, коэффициент Пуассона и вектор Бюргерса в соответствии с работой [17].

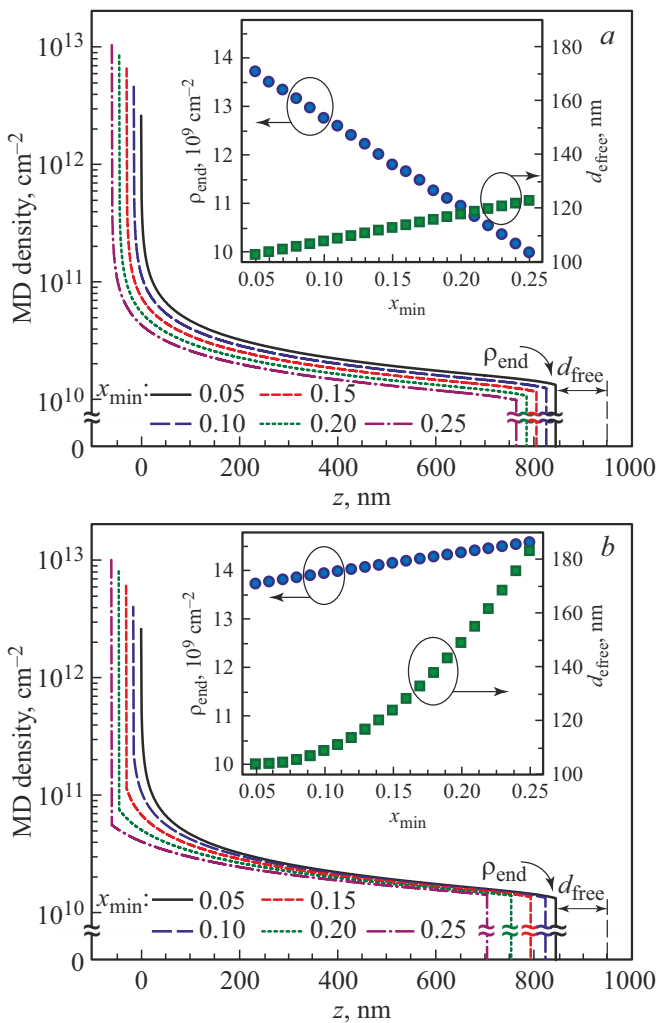
Необходимые параметры для расчета, такие как параметр решетки, длина вектора Бюргерса, модули упругости и др., были взяты из работы [14]. Угол между вектором Бюргерса и линией дислокации ( $\alpha$ ) принимался равным  $60^\circ$ , учитывая тот факт, что в гетероструктурах с кристаллической решеткой типа цинковой обманки наиболее характерными ДН являются  $60^\circ$  дислокации. Во всех расчетах настоящей работы, в отличие от работ [14,17], шаг сетки ( $h = L/N$ ) составлял 1 нм, что позволило устранить возникновение артефактов при выполнении расчетов МБС со вставками  $\text{GaAs}$  нанометровой толщины и многослойных НЕМТ-гетероструктур, а также повысить точность проведенных расчетов. Итерационный процесс расчета останавливался при достижении точности определения плотности ДН, равной  $50 \text{ см}^{-2}$ .

## 3. Результаты и обсуждение

Ранее нами были теоретически [14] и экспериментально [18,19] исследованы характер и особенности распределения ДН и упругих напряжений в МБС  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  с корневым профилем изменения состава в зависимости от конечного содержания  $\text{In}$  ( $x_{\max}$ ). При этом вопрос о влиянии начального состава МБС ( $x_{\min}$ ) на его свойства до сих пор подробно не исследовался, а значения  $x_{\min}$ , используемые в различных работах [20,21], варьируются в широком диапазоне, 0.05–0.15.

В настоящей работе теоретически исследовалось влияние значения  $x_{\min}$  в МБС  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  с корневым профилем на плотность ДН и толщину бездислокационной области ( $d_{\text{free}}$ ) в его верхней части. Для этого, используя представленный в разд. 2 численный метод, были проведены расчеты равновесного распределения плотности ДН вдоль оси роста для двух серий МБС  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  с различным начальным содержанием  $\text{In}$  ( $x_{\min} = 0.05$ – $0.25$ ) и отличающихся типом корневого профиля изменения состава (рис. 1).

Профили изменения состава МБС первой серии представляли собой зависимости вида  $x(z) = x_{\min} + (x_{\max} - x_{\min})(z/L)^{1/2}$ , где конечный состав ( $x_{\max}$ ) и толщина ( $L$ ) МБС оставались неизменными и равными 0.79 и 950 нм соответственно. Профили изменения состава МБС второй серии получались из зависимости  $x(z) = x_{\min} + (x_{\max} - x_{\min})(z/L)^{1/2}$ , где  $x_{\min} = 0.05$ ,  $x_{\max} = 0.79$ ,  $L = 950$  нм, путем отсечения нижней части



**Рис. 1.** Равновесное распределение плотности ДН вдоль оси роста для двух серий МБС  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  с различным начальным содержанием  $\text{In}$   $x_{\min} = 0.05–0.25$  и отличающихся видом корневого профиля изменения состава: *a* —  $x(z) = x_{\min} + (x_{\max} - x_{\min})(z/L)^{1/2}$ , где  $x_{\max} = 0.79$ ,  $L = 950$  нм — конечный состав и толщина МБС соответственно; *b* — получающегося из профиля  $x(z) = x_{\min} + (x_{\max} - x_{\min})(z/L)^{1/2}$ , где  $x_{\min} = 0.05$ ,  $x_{\max} = 0.79$ ,  $L = 950$  нм, путем отсечения нижней части МБС до необходимого значения  $x_{\min}$ . Расчетные зависимости смещены друг относительно друга на 15 нм для простоты восприятия. На вставках — зависимости плотности ДН в верхней части МБС ( $\rho_{\text{end}}$ ) и толщины бездислокационной области ( $d_{\text{free}}$ ) от начального состава  $x_{\min}$ .

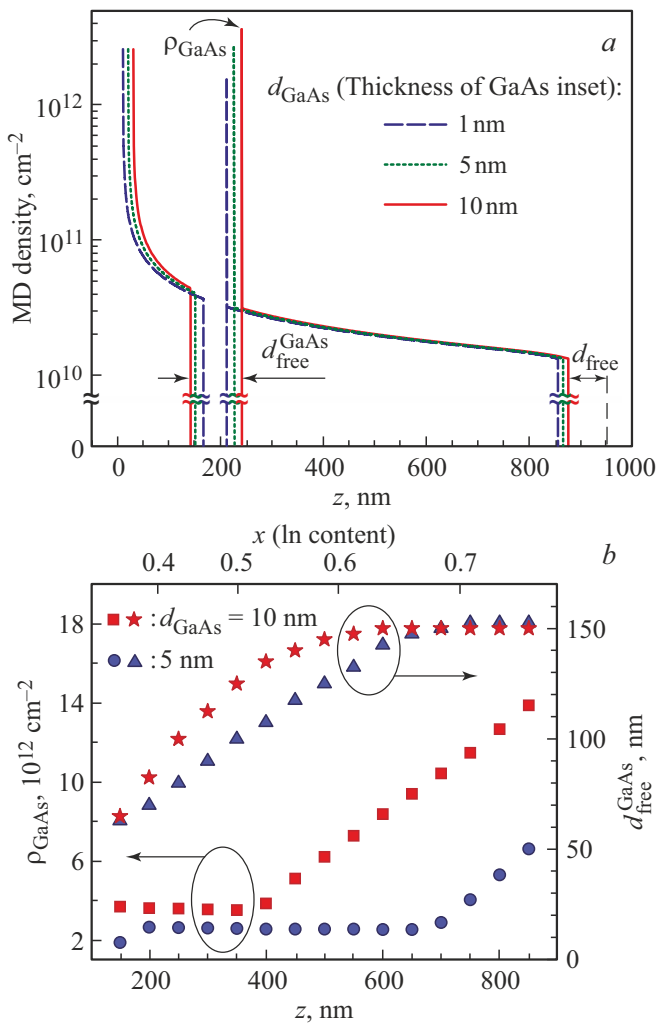
(уменьшения толщины) МБС до необходимого минимального состава  $x_{\min}$ . Результаты расчетов для МБС первой и второй серии приведены на рис. 1, *a* и *b* соответственно. На вставках к рисункам показаны зависимости плотности ДН в верхней части МБС ( $\rho_{\text{end}}$ ) и толщины бездислокационной области ( $d_{\text{free}}$ ) от величины  $x_{\min}$ . Видно, что в МБС первой серии при увеличении  $x_{\min}$  от 0.05 до 0.25  $\rho_{\text{end}}$  спадает в 1.4 раза, в то время как  $d_{\text{free}}$  увеличивается незначительно с 100 до 120 нм. В МБС второй серии при увеличении  $x_{\min}$  величина

$d_{\text{free}}$  возрастает почти в 2 раза, а  $\rho_{\text{end}}$  увеличивается в отличие от первой серии, что, по всей видимости, объясняется уменьшением толщины МБС. При этом увеличение толщины  $d_{\text{free}}$  с увеличением  $x_{\min}$  в МБС второй серии происходит нелинейно и при значениях  $x_{\min} > 0.15$  значительно быстрее, чем в первой серии.

Таким образом, минимальная расчетная плотность ДН ( $\rho_{\text{end}} \sim 9.9 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$ ), предшествующая бездислокационной области, достигается в МБС первой серии при использовании максимального начального содержания  $\text{In}$   $x_{\min} = 0.25$ . Это объясняется тем, что в первой серии при неизменной толщине МБС использование больших значений  $x_{\min}$  позволяет сделать выход на конечный состав  $x_{\max} = 0.79$  более плавным. Следует отметить, что значения  $x_{\min} > 0.25$  не рассматривались, так как при выращивании таких МБС резко возрастает вероятность перехода режима эпитаксиального роста из послойного (двухмерного) в трехмерный.

Важной задачей при создании метаморфных гетероструктур также является снижение плотности ПД, которая коррелирует с плотностью ДН [22]. Один из подходов, приводящий к уменьшению плотности ПД в метаморфных структурах, заключается в использовании одиночных упругонапряженных слоев в МБС, позволяющих изменять направление распространения ПД вплоть до их загиба в плоскости роста. Эффективность данного подхода была впервые продемонстрирована на примере системы  $\text{GaN}/\text{AlN}$  [23], а также экспериментально подтверждена нами для системы  $(\text{In,Ga,Al})(\text{As,Sb})$  [24]. Тем не менее, в силу отсутствия полной теории релаксации упругих напряжений для МБС с произвольным профилем изменения состава, задача по оптимизации толщин упругонапряженных слоев и их положения в МБС остается актуальной и на сегодняшний день.

В данной работе исследовался характер распределения ДН вдоль оси роста МБС  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  с корневым профилем изменения состава в зависимости от толщины и положения упругорастянутых слоев  $\text{GaAs}$  в МБС. На рис. 2, *a* представлены результаты расчетов равновесного распределения плотности ДН вдоль оси роста для МБС  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ , содержащих вставку  $\text{GaAs}$  различной толщины 1–10 нм при достижении состава  $x \sim 0.39$  ( $z = 200$  нм). Из рис. 2, *a* видно, что вне зависимости от толщины вставки  $\text{GaAs}$  под ней образуется бездислокационная область, характеризующаяся толщиной  $d_{\text{free}}^{\text{GaAs}}$  и подобная той, которая образуется в верхней части МБС. При этом с увеличением толщины вставки от 1 до 10 нм значение  $d_{\text{free}}^{\text{GaAs}}$  возрастает с 43 до 97 нм, а плотность ДН в области МБС сразу после вставки ( $\rho_{\text{GaAs}}$ ) возрастает с  $1.5 \cdot 10^{12}$  до  $3.6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$  (см. табл. 1). Отметим, что образование бездислокационной области в „корневом“ МБС  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  было обнаружено нами ранее экспериментально при исследовании таких структур с помощью метода просвечивающей электронной микроскопии в геометрии поперечного сечения [24], а полученное расчетное значение  $d_{\text{free}}^{\text{GaAs}} = 74$  нм в случае вставки  $\text{GaAs}$  толщиной 5 нм хорошо коррелирует с соответствующим экспериментальным (75–97 нм).



**Рис. 2.** *a* — равновесные распределения плотности ДН вдоль оси роста МБС  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  с корневым профилем изменения состава, содержащих одиночную упругонапряженную вставку GaAs различной толщины 1–10 нм при достижении состава  $x \sim 0.39$  ( $z = 200$  нм). Расчетные зависимости смещены друг относительно друга на 10 нм для простоты восприятия; *b* — зависимости толщины бездислокационной области ( $d_{\text{free}}^{\text{GaAs}}$ ), расположенной под вставкой GaAs, а также плотности ДН в области МБС сразу после вставки GaAs ( $\rho_{\text{GaAs}}$ ) от ее положения.

На рис. 2, *b* представлены зависимости  $\rho_{\text{GaAs}}$  и  $d_{\text{free}}^{\text{GaAs}}$  от положения вставки GaAs толщиной 5 и 10 нм в МБС  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  с корневым профилем изменения состава. Влияние положения вставки GaAs толщиной 1 нм на значения  $\rho_{\text{GaAs}}$  и  $d_{\text{free}}^{\text{GaAs}}$  не исследовалось, так как ранее было экспериментально показано, что МБС, содержащие вставки GaAs толщиной 1 нм, по своим структурным свойствам практически не отличались от МБС без вставки [24]. В случае вставок GaAs толщиной 5 и 10 нм из рис. 2, *b* видно, что зависимость  $d_{\text{free}}^{\text{GaAs}}(z)$  сначала возрастает, а затем при  $z \sim 650$  нм выходит на насыщение. При этом величина плотности ДН в области МБС сразу

**Таблица 1.** Значения  $\rho_{\text{GaAs}}$  и  $d_{\text{free}}^{\text{GaAs}}$  при различной толщине вставки GaAs, расположенной в МБС  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  с корневым профилем изменения состава при  $x \sim 0.39$  ( $z = 200$  нм)

Толщина вставки GaAs, нм	$\rho_{\text{GaAs}}$ , $\text{cm}^{-2}$	$d_{\text{free}}^{\text{GaAs}}$ , нм
1	$1.5 \cdot 10^{12}$	43
5	$2.6 \cdot 10^{12}$	74
10	$3.6 \cdot 10^{12}$	97

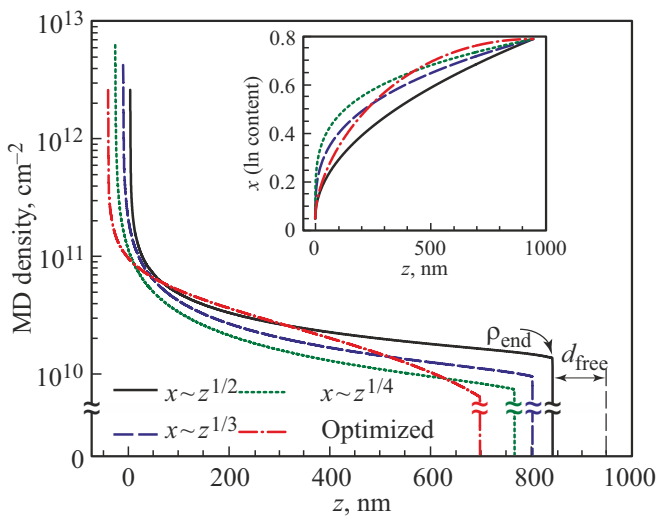
за вставкой  $\rho_{\text{GaAs}}$  остается постоянной при изменении положения вставки до значений  $z \sim 700$  и 400 нм для вставок толщиной 5 и 10 нм соответственно, а затем при больших значениях  $z$  наблюдается резкий рост  $\rho_{\text{GaAs}}$ , по всей видимости, обусловленный релаксацией упругих напряжений в самой вставке.

Ранее нами было показано, что существенное снижение приповерхностной плотности дислокаций в МБС с корневым профилем изменения состава по толщине по сравнению со случаем „линейного“ МБС обусловлено тем, что „корневой“ МБС характеризуется быстрым изменением состава в нижней области, граничащей с подложкой GaAs, и плавным — в его верхней части [16]. Кроме того, такой профиль МБС приводит к снижению разупорядоченности твердого раствора в области больших составов [15]. С целью поиска формы профиля, который приводил бы к меньшей плотности дефектов, были проведены расчеты распределения плотности ДН вдоль оси роста для МБС  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  с различными нелинейными профилями изменения состава вида  $x(z) = x_{\text{min}} + (x_{\text{max}} - x_{\text{min}})(z/L)^{1/n}$ , где  $L$  — толщина МБС, равная 950 нм,  $x_{\text{min}}$  и  $x_{\text{max}}$  — начальное и конечное содержание In в МБС, равное 0.05 и 0.79 соответственно, а  $n$  — натуральное число от 2 до 5 (рис. 3).

Как видно из вставки на рис. 3, с увеличением  $n$  крутизна профиля изменения состава на начальном участке возрастает, а на конечном, соответственно, падает, что должно приводить к уменьшению плотности ДН. Действительно, результаты моделирования показали, что наименьшая плотность ДН ( $\rho_{\text{end}}$ ), а также наибольшая толщина бездислокационной области ( $d_{\text{free}}$ ) достигается в МБС с наибольшим значением  $n$  (см. рис. 3 и табл. 2).

Тем не менее технологическая реализация таких МБС с  $n > 2$  затруднена в связи с резким изменением состава на первых десятках нанометров (см. вставку на рис. 3). Для решения данной проблемы предлагается профиль (см. формулу (2)), начальная часть которого определяется корневой зависимостью  $\propto z^{1/2}$ , а конечная часть степенной зависимостью  $\propto z^{1/n}$  с максимально большим  $n$

$$x(z) = x_{\text{min}} + (x_{\text{max}} - x_{\text{min}}) \times \left( \frac{(L-z)(\frac{z}{L})^{1/2} + z \cdot \lim_{n \rightarrow \infty} (\frac{z}{L})^{1/n}}{L} \right). \quad (2)$$



**Рис. 3.** Равновесное распределение плотности ДН вдоль оси роста для МБС  $In_xAl_{1-x}As$  с различными нелинейными профилями изменения состава вида  $x(z) \propto z^{1/n}$  и оптимизированным профилем  $x(z) = x_{min} + (x_{max} - x_{min}) \times ((z/L)^{1/2} + (z/L) - (z/L)^{3/2})$ . Расчетные зависимости смещены друг относительно друга на 15 нм для простоты восприятия. На вставке приведены соответствующие профили изменения состава МБС.

Упростив формулу (2), получаем окончательное выражение для оптимизированного профиля изменения состава МБС  $In_xAl_{1-x}As$ :  $x(z) = x_{min} + (x_{max} - x_{min}) \times ((z/L)^{1/2} + (z/L) - (z/L)^{3/2})$ . Для МБС с таким профилем было также рассчитано равновесное распределение плотности ДН вдоль оси роста и установлено, что МБС с оптимизированным нелинейным профилем изменения состава позволяет снизить плотность приповерхностных ДН ( $\rho_{end}$ ) в  $\sim 2.2$  раза, а также увеличить вдвое толщину бездислокационной области ( $d_{free}$ ) по сравнению с „корневым“ МБС (см. табл. 2).

Для понимания влияния конструкции МБС на особенности релаксации упругих напряжений непосредственно в метаморфных гетероструктурах были проведены расчеты равновесного распределения плотности ДН по толщине двух *m*НЕМТ-гетероструктур (структур А и В), отличающихся между собой только конструкцией МБС. Структуры А и В включали в себя МБС  $In_xAl_{1-x}As$  с корневым ( $x \propto z^{1/2}$ ) и оптимизированным нелинейным профилем изменения состава (см. формулу (2)) соответственно. В расчетах использовалась следующая последовательность слоев, характерная для НЕМТ-гетероструктур (рис. 4, а): подложка GaAs, МБС  $In_xAl_{1-x}As$  (950 нм), нижний барьерный слой  $In_{0.75}Al_{0.25}As$  (виртуальная подложка — VS) толщиной 40 нм, квантовая яма  $In_{0.75}Ga_{0.25}As$  (24 нм), верхний барьерный слой  $In_{0.75}Al_{0.25}As$  (84 нм) и прикрывающий слой  $In_{0.75}Ga_{0.25}As$  (4 нм). Величина обратной ступени варьировалась в пределах  $\Delta = 0.02 - 0.14$  путем соответствующего изменения конечного содержания In

**Таблица 2.** Плотность ДН ( $\rho_{end}$ ) и толщина бездислокационной области ( $d_{free}$ ) в верхней части МБС  $In_xAl_{1-x}As$  с различными нелинейными профилями изменения состава ( $x_{min} = 0.05, x_{max} = 0.79, L = 950$  нм)

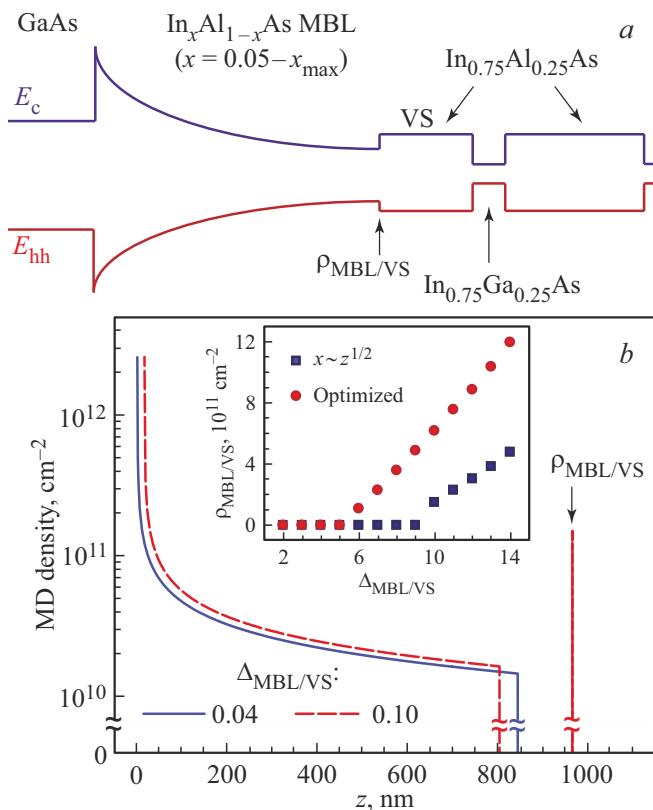
Профиль изменения состава $x(z)$ МБС $In_xAl_{1-x}As$	$\rho_{end}, cm^{-2}$	$d_{free}, nm$
$x_{min} + (x_{max} - x_{min})(z/L)^{1/2}$	$1.4 \cdot 10^{10}$	104
$x_{min} + (x_{max} - x_{min})(z/L)^{1/3}$	$9.3 \cdot 10^9$	129
$x_{min} + (x_{max} - x_{min})(z/L)^{1/4}$	$7.2 \cdot 10^9$	150
$x_{min} + (x_{max} - x_{min})(z/L)^{1/5}$	$5.9 \cdot 10^9$	167
$x_{min} + (x_{max} - x_{min}) \times ((z/L)^{1/2} + (z/L) - (z/L)^{3/2})$	$6.2 \cdot 10^9$	204

в МБС ( $x_{max}$ ). Было установлено, что в структуре А при использовании величины  $\Delta < 0.10$  релаксация упругих механических напряжений происходит исключительно внутри МБС, а в активных слоях *m*НЕМТ-структуры полностью отсутствует (см. вставку на рис. 4, б). В то же время при значениях обратной ступени  $\Delta \geq 0.10$  наблюдается релаксация упругих напряжений на интерфейсе МБС/виртуальная подложка (рис. 4, б). Следует отметить, что полученные результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными. Так, например, ранее нами было показано, что в случае оптических метаморфных гетероструктур  $In(As,Sb)/In(Ga,Al)As$ , полученных методом молекулярно-пучковой эпитаксии на подложках GaAs и содержащих МБС  $InAlAs$  с корневым профилем изменения состава, максимальное значение внутренней квантовой эффективности достигалось при  $\Delta = 0.08 - 0.10$  [18,19].

При этом в структурах  $In(As,Sb)/In(Ga,Al)As$  с  $\Delta \geq 0.12$  при их исследовании методом просвечивающей электронной микроскопии в геометрии поперечного сечения были действительно обнаружены ПД, зарождающиеся на интерфейсе МБС/виртуальная подложка [19]. Кроме того, расчетное значение толщины бездислокационной области в верхней части МБС  $d_{free} = 103$  нм для структуры А с  $\Delta = 0.04$  хорошо согласуется с экспериментальным значением, определенным методом локальной дифракции электронов от выделенной области ( $\sim 110$  нм) [25]. Следует отметить, что использование в *m*НЕМТ-гетероструктуре МБС с нелинейным оптимизированным профилем изменения состава (структура В) приводит к тому, что релаксация упругих напряжений с образованием ДН на интерфейсе МБС/виртуальная подложка происходит при значительно меньших значениях величины обратной ступени  $\Delta \geq 0.06$  (см. вставку на рис. 4, б).

Представляется интересным провести оценку плотности ПД в гетероструктурах, содержащих МБС с нелинейным оптимизированным профилем изменения состава. Ранее было показано, что МБС с корневым профилем изменения состава позволяет снизить плотность ДН в его верхней части в  $\sim 2$  раза по сравнению





**Рис. 4.** *a* — схематическая зонная диаграмма метаморфной НЕМТ-гетероструктуры, включающей МБС  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  с нелинейным профилем изменения состава, виртуальную подложку (VS)  $\text{In}_{0.75}\text{Al}_{0.25}\text{As}$  и двумерный электронный канал  $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{As}/\text{In}_{0.75}\text{Al}_{0.25}\text{As}$ ; *b* — равновесные распределения плотности ДН вдоль оси роста структуры А с различным значением обратной степени  $\Delta = 0.04$  и  $0.10$ . Расчетные зависимости смещены друг относительно друга на  $15\text{ нм}$  для простоты восприятия. На вставке приведены плотности ДН на интерфейсе МБС/виртуальная подложка в зависимости от значения обратной степени для структур А и В.

с МБС с линейным профилем [14]. При этом экспериментально было показано, что плотность ПД, коррелирующая с плотностью ДН, в структурах, содержащих МБС с корневым профилем, в 3 раза меньше, чем в структурах, содержащих „линейный“ МБС, и составляет  $(5 \pm 2) \cdot 10^7 \text{ см}^{-2}$  [3]. Учитывая данные факты, а также то, что предложенный в настоящей работе МБС с оптимизированным нелинейным профилем изменения состава позволяет снизить плотность ДН в  $\sim 2.2$  раза по сравнению с „корневым“ МБС, следует ожидать снижения плотности ПД в структурах, содержащих МБС с оптимизированным профилем, до значений  $\sim 10^7 \text{ см}^{-2}$ .

#### 4. Заключение

Проведены расчеты равновесного распределения плотности ДН вдоль оси роста для МБС  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  с различным начальным содержанием In

( $x_{\min} = 0.05-0.25$ ) и отличающихся типом корневого профиля изменения состава. Установлено, что минимальная расчетная плотность ДН в верхней части МБС достигается в случае  $x_{\min} = 0.25$ . Исследована зависимость распределения ДН вдоль оси роста МБС  $\text{InAlAs}$  с корневым профилем изменения состава от толщины и положения одиночных ультратонких ( $1-10\text{ нм}$ ) упругонапряженных слоев GaAs в МБС. Путем численного моделирования показано, что вне зависимости от толщины вставки GaAs под ней образуется бездислокационная область, подобная той, которая образуется в верхней части МБС, и наблюдавшаяся нами ранее экспериментально. При этом значение толщины данной области, свободной от дислокаций, хорошо согласуется с экспериментальным значением, полученным с помощью просвечивающей электронной микроскопии в геометрии поперечного сечения. Проведены расчеты равновесного распределения плотности ДН вдоль направления эпитаксиального роста МБС  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  с максимальным содержанием In  $x_{\max} \geq 0.77$  и различными нелинейными профилями изменения состава вида  $x \propto z^{1/n}$ . Предложен оптимизированный нелинейный профиль изменения состава МБС  $\text{InAlAs}$ , позволяющий получать в его верхней части вдвое меньшую плотность ДН, чем корневого профиля. Проведены расчеты равновесного распределения плотности ДН по толщине метаморфных НЕМТ-гетероструктур, содержащих МБС  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  различной конструкции и двумерный электронный канал  $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{As}/\text{In}_{0.75}\text{Al}_{0.25}\text{As}$ ; в НЕМТ-структурах МБС с корневым и оптимизированным профилем изменения состава установлены значения обратной степени:  $\Delta < 0.10$  и  $\Delta < 0.06$  соответственно, при которых релаксация упругих напряжений происходит исключительно в МБС, а в активных слоях *m*НЕМТ-гетероструктур полностью отсутствует. Проведена оценка плотности ПД в гетероструктурах, содержащих МБС с нелинейным оптимизированным профилем изменения состава, которая позволяет ожидать снижение ПД в таких структурах до значений  $10^7 \text{ см}^{-2}$ .

#### Финансирование работы

М.Ю. Чернов благодарит Российский научный фонд (грант № 22-79-00265) за частичную поддержку данных исследований.

#### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

#### Список литературы

- [1] S.H. Shin, J.-P. Shim, H. Jang, J.-H. Jang. *Micromachines*, **14** (1), 56 (2023).
- [2] J. Ajayan, D. Nirmal. *Superlat. Microstruct.*, **86**, 1 (2015).

- [3] S.V. Ivanov, M.Yu. Chernov, V.A. Solov'ev, P.N. Brunkov, D.D. Firsov, O.S. Komkov. *Progr. Cryst. Growth Charact. Mater.*, **65** (1), 20 (2019).
- [4] S. Ke, D. Li, S. Chen. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **53**, 323001 (2020).
- [5] Y. Du, B. Xu, G. Wang, Y. Miao, B. Li, Z. Kong, Y. Dong, W. Wang, H.H. Radamson. *Nanomaterials*, **12** (5), 741 (2022).
- [6] M.S. Abrahams, L.R. Wiesberg, C.J. Buiocchi, J. Blanc. *J. Mater. Sci.*, **4**, 223 (1969).
- [7] J. Tersoff. *Appl. Phys. Lett.*, **62**, 693 (1993).
- [8] G.B. Galiev, S.S. Pushkarev, E.A. Klimov, P.P. Maltsev, R.M. Imamov, I.A. Subbotin. *Crystallography Reports*, **59**, 258 (2014).
- [9] L.W. Khai, T.K. Hua, L. Daosheng, S. Wicaksono, Y.S. Fatt. *IEEE Phot. Techn. Lett.*, **29** (5), 458 (2017).
- [10] Y. He, W. Yan. *Optical Quant. Electron.*, **52**, 372 (2020).
- [11] S. Park, J. Jeon, V.M. More, R.S. Lee, Y. Seo, M. Kim, P.D. Nguyen, M. Kim, J.S. Kim, Y. Kim, S.J. Lee. *Appl. Surf. Sci.*, **581**, 152421 (2022).
- [12] D.J. Dunstan. *J. Mater. Sci.: Mater. Electron.*, **8**, 337 (1997).
- [13] F. Romanato, E. Napolitani, A. Carnera, A.V. Drigo, L. Lazzarini, G. Salviati, C. Ferrari, A. Bosacchi, S. Franchi. *J. Appl. Phys.*, **86**, 4748 (1999).
- [14] Д.В. Побат, В.А. Соловьев, М.Ю. Чернов, С.В. Иванов. *ФТТ*, **63** (1), 85 (2021).
- [15] H. Choi, Y. Jeong, J. Cho, M.H. Jeon. *J. Cryst. Growth*, **311** (4), 1091 (2009).
- [16] M.Yu. Chernov, O.S. Komkov, D.D. Firsov, B.Ya. Meltser, A.N. Semenov, Ya.V. Terent'ev, P.N. Brunkov, A.A. Sitnikova, P.S. Kop'ev, S.V. Ivanov, V.A. Solov'ev. *J. Cryst. Growth*, **477**, 97 (2017).
- [17] B. Bertoli, E.N. Suarez, J.E. Ayers, F.C. Jain. *J. Appl. Phys.*, **106**, 073519 (2009).
- [18] M.Yu. Chernov, V.A. Solov'ev, O.S. Komkov, D.D. Firsov, B.Ya. Meltser, M.A. Yagovkina, M.V. Baidakova, P.S. Kop'ev, S.V. Ivanov. *Appl. Phys. Express*, **10**, 121201 (2017).
- [19] O.S. Komkov, D.D. Firsov, M.Yu. Chernov, V.A. Solov'ev, A.A. Sitnikova, P.S. Kop'ev, S.V. Ivanov. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **51**, 055106 (2018).
- [20] G.B. Galiev, S.S. Pushkarev, I.S. Vasil'evskii, E.A. Klimov, R.M. Imamov, I.A. Subbotin, E.S. Pavlenko, A.L. Kvanin. *Crystallography Reports*, **57**, 841 (2012).
- [21] T. Ganbold, M. Antonelli, G. Biasiol, G. Cautero, H. Jark, D.M. Eichert, R. Cucini, R.H. Menk. *J. Instrum.*, **9**, C12043 (2014).
- [22] M. Tamura, A. Hashimoto, Y. Nakatsugawa. *J. Appl. Phys.*, **72**, 3398 (1992).
- [23] V.N. Jmerik, D.V. Nechaev, S. Rouvimov, V.V. Ratnikov, P.S. Kop'ev, M.V. Rzhetski, E.V. Lutsenko, G.P. Yablonskii, M. Aljohenii, A. Aljerwii, A. Alyamani, S.V. Ivanov. *J. Mater. Res.*, **30**, 2871 (2015).
- [24] В.А. Соловьев, М.Ю. Чернов, О.С. Комков, Д.Д. Фирсов, А.А. Ситникова, С.В. Иванов. *Письма ЖЭТФ*, **109** (6), 381 (2019).
- [25] V.A. Solov'ev, M.Yu. Chernov, M.V. Baidakova, D.A. Kirilenko, M.A. Yagovkina, A.A. Sitnikova, T.A. Komissarova, P.S. Kop'ev, S.V. Ivanov. *Superlat. Microstruct.*, **113**, 777 (2018).

Редактор Г.А. Оганесян

## Reduction of misfit dislocation density in metamorphic heterostructures by design optimization of the buffer layer with non-linear graded composition profile

M.Yu. Chernov, V.A. Solov'ev, S.V. Ivanov

loffe Institute,  
194021 St. Petersburg, Russia

**Abstract** Equilibrium distributions of misfit dislocation density along the growth direction of metamorphic buffer layers  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  with maximum In content  $x_{\max} \geq 0.77$  and different non-linear graded composition profiles ( $x \propto z^{1/n}$ ) are calculated. The effect of the initial In composition ( $x_{\min}$ ) of  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  buffer layer with convex-graded ( $n = 2$ ) composition profile on misfit dislocation density as well as amount of residual stresses at its top part is considered. Using computational approach, it was shown that a dislocation-free region is formed under thin tensile-strained GaAs layer (1–10 nm) inserted into  $\text{InAlAs}$  metamorphic buffer layer, which agrees with experimental data obtained early by transmission electron microscopy. Novel non-linear graded composition profile of metamorphic buffer layer has been proposed, which results in twice reduction of misfit dislocation density as compared to the convex-graded one. In addition, equilibrium distributions of misfit dislocation density in the HEMT heterostructures with two-dimensional electron channel  $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{As}/\text{In}_{0.75}\text{Al}_{0.25}\text{As}$ , which are based on  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  metamorphic buffer layer of various designs, are calculated. The values of inverse steps ( $\Delta$ ), representing the difference between the maximum In content of  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  ( $x_{\max}$ ) and In content of  $\text{In}_{0.75}\text{Al}_{0.25}\text{As}$  virtual substrate, at which relaxation of the elastic strains in 2D channel  $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{As}/\text{In}_{0.75}\text{Al}_{0.25}\text{As}$  doesn't occur, are calculated for metamorphic buffer layers  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  with convex-graded and optimized non-linear graded composition profiles.