

Влияние морфологии подложек InP на шероховатость интерфейсов и дефектность гетероструктур квантово-каскадных лазеров

© Д.С. Папылев¹, И.И. Новиков^{1,2}, В.В. Андрюшкин^{1,2}, А.Г. Гладышев², В.В. Дюделев³,
Л.Я. Каракинский^{1,2}, А.В. Бабичев¹, И.А. Няпшаев³, А.Ю. Егоров^{2,3}, Г.С. Соколовский³

¹ Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет ИТМО,
197101 Санкт-Петербург, Россия

² ООО „Коннектор Оптикас“,
194292 Санкт-Петербург, Россия

³ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: dspapylev@itmo.ru

Поступила в Редакцию 18 сентября 2025 г.

В окончательной редакции 23 октября 2025 г.

Принята к публикации 5 ноября 2025 г.

Исследовано влияние подложек InP различных производителей на структурные характеристики гетероструктур квантово-каскадных лазеров, выращенных методом молекулярно-пучковой эпитаксии на зараженных методом металлоорганической газофазной эпитаксии темплейтах. Комплексный анализ методами рентгеновской рефлектометрии и оптической дефектометрии выявил уменьшение среднеквадратичного значения шероховатости интерфейсов на 42–47% и уменьшение плотности точечных дефектов в 1.5–4.0 раза при использовании подложек одного производителя при одинаковых номинальных параметрах подложек. Результаты подтверждают критическую роль качества подложек в снижении плотности точечных дефектов и шероховатости интерфейсов гетероструктур квантово-каскадных лазеров.

Ключевые слова: квантово-каскадный лазер, шероховатость интерфейсов, дефекты, рентгеновская рефлектометрия, гетероструктура.

DOI: 10.61011/FTP.2025.07.62009.8580

1. Введение

Гетероструктуры со сверхрешетками InGaAs/InAlAs на подложках InP являются основой для создания квантово-каскадных лазеров (ККЛ) среднего ИК диапазона [1–3]. В таких сверхрешетках, содержащих слои толщиной в несколько монослоев, отклонение фактических толщин слоев от номинальных и неидеальности интерфейсов могут существенно влиять на параметры лазера [4]. В частности, шероховатость интерфейсов гетероструктуры является причиной упругого рассеяния электронов, вызывающего паразитные энергетические переходы электронов. В результате эти процессы формируют токи утечки и влияют на заселенность верхних излучательных уровней [5,6]. Кроме того, шероховатость интерфейсов может влиять на вероятность резонансного туннелирования электронов, тем самым препятствуя эффективному транспорту носителей заряда [7]. Таким образом, шероховатость интерфейсов гетероструктуры существенно влияет на квантовую эффективность и пороговый ток ККЛ [8,9].

Известно, что при эпитаксии гетероструктур наличие изначальных дефектов поверхности подложки влияет на структурное качество выращиваемых эпитаксиальных слоев [10]. Несмотря на то что формирование буферного слоя гетероструктуры методом газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений (МОГФЭ) потенциально улучшает морфологию поверхности [11], вли-

яние исходных подложек InP на структурное качество сверхрешетки ККЛ изучено недостаточно. В настоящей работе исследуется влияние выбора подложек на шероховатость интерфейсов и плотность точечных дефектов гетероструктуры ККЛ.

2. Материалы и методы

В рамках настоящей работы исследовалось качество интерфейсов тестовых гетероструктур ККЛ, выращенных с использованием легированных n^+ InP (100) подложек диаметром 2" (два дюйма) двух различных производителей, обозначаемых в дальнейшем Р1 (производство Китай) и Р2 (производство США). Подложки обоих типов имеют номинально идентичные характеристики согласно спецификациям производителей. Перед эпитаксией сверхрешеток ККЛ с использованием подложек Р1 и Р2 были изготовлены темплейты Т1 и Т2 соответственно. Для этого подложки методом МОГФЭ в раздельных технологических процессах зашивались слоем InP толщиной 5000 нм. На изготовленных темплейтах методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) выращивались тестовые гетероструктуры ККЛ S1 (темплейт Р1) и S2 (темплейт Р2) в двух последовательных технологических процессах. Конструкция гетероструктуры состояла из подложки InP, выращенного методом МОГФЭ обкладочного слоя InP толщиной 5000 нм, буферного слоя n -In_{0.53}Ga_{0.47}As толщиной 50 нм и 10 каскадов

сверхрешетки $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{As}/\text{In}_{0.37}\text{Al}_{0.63}\text{As}$ толщиной 2.7/2.1/0.9/3.2/2.6/0.9/3.0/2.1/1.7/2.4/1.5/1.5/2.2/1.5/1.5/2.0/1.3/1.6/1.8/1.3/1.7/2.8/1.9/2.8/2.4/2.8 нм общей толщиной 52.2 нм. Завершающим слоем гетероструктуры был $n\text{-In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ толщиной 5 нм.

Распространенным методом анализа параметров гетероструктуры является метод рентгеновской дифрактометрии, который позволяет оценить состав эпитаксиальных слоев гетероструктуры ККЛ и определить толщину каскадов гетероструктуры ККЛ с точностью ~ 1 нм. Однако оценка шероховатости интерфейсов гетероструктуры по кривым рентгеновской дифракции представляет затруднительной. В связи с этим для исследования гетероструктур был использован метод рентгеновской рефлектометрии [12], отличительной особенностью которого является более высокая чувствительность к толщинам и шероховатости интерфейсов, а также малая чувствительность к составу слоев.

Гетероструктуры исследовались с использованием дифрактометра высокого разрешения PANalytical X'Pert PRO MRD с гибридным четырех-кристальным щелевым Ge (400) монохроматором и CuK α -1 излучением. Измерения методом рентгеновской рефлектометрии производились в режиме $2\Theta/\omega$ -сканирования в угловом диапазоне 0–7.2° с шагом 0.005°. Расходимость рентгеновского пучка ограничена щелями (1/32°) и (1/16°) для первичного и отраженного излучения соответственно.

Дополнительно поверхность гетероструктур была исследована методом оптической дефектометрии на установке KLA-Tencor Surfscan 6200, оборудованной лазером с рабочей длиной волны 488 нм. Измерения проводились в двух диапазонах детектирования точечных дефектов, определяемых усилением на фотоумножителе. Диапазоны эквивалентной площади поперечного сечения дефектов составляли 0.6–10 и 10–250 мкм². Шероховатость поверхности в методе оптической дефектометрии характеризовалась параметром $haze$, выраженным в долях интенсивности рассеянного излучения к интенсивности излучения лазера. Соотношение между величиной $haze$ и среднеквадратичным значением шероховатости поверхности пластины σ_{optic} определялось в соответствии с выражением [13]:

$$haze = (4 \cdot \pi \cdot \cos(\theta_i)/\lambda)^2 \cdot R_0 \cdot \sigma_{\text{optic}}^2, \quad (1)$$

где θ_i — угол падения лазерного излучения на поверхность, λ — длина волны излучения, R_0 — коэффициент отражения поверхности.

3. Результаты

Измеренные кривые рентгеновской рефлектометрии тестовых гетероструктур S1 и S2 представлены на рис. 1. При сравнении результатов полученные кривые совмещаются по положению критического угла полного внешнего отражения. При этом показательными характеристиками шероховатости являются скорость спада

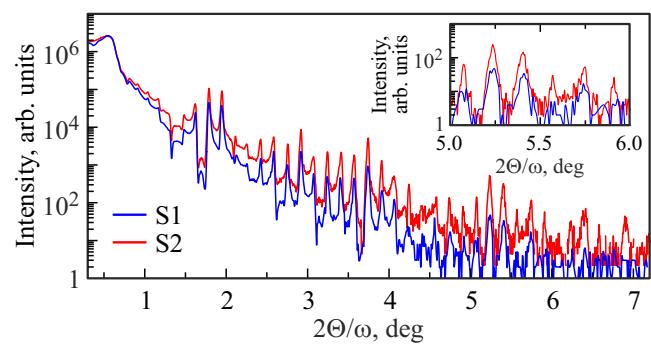


Рис. 1. Результаты измерения рентгеновской рефлектометрии гетероструктур S1 и S2. На вставке изображен увеличенный фрагмент графика при больших углах сканирования.

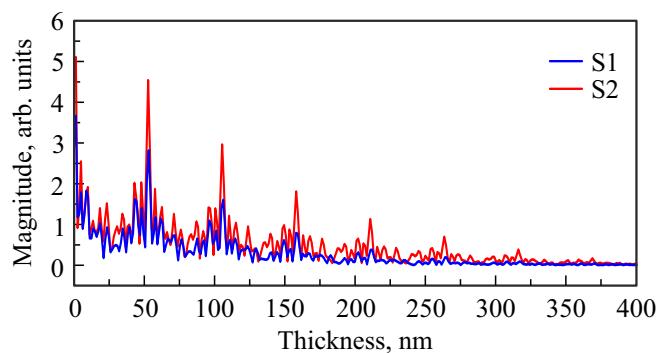


Рис. 2. Результаты преобразования Фурье кривой рентгеновской рефлектометрии гетероструктур S1 и S2.

интенсивности вблизи критического угла, определяемая шероховатостью поверхности верхнего слоя, и интенсивность пиков осцилляций, определяемая шероховатостью интерфейсов. Качественное сравнение кривых рентгеновской рефлектометрии позволяет судить о несколько большей шероховатости поверхности гетероструктуры S1, выращенной на подложке P1. Более существенные различия, характеризующие сравнительно большую шероховатость гетероструктуры S1, наблюдаются по интенсивности пиков осцилляций, особенно заметных при больших углах сканирования, как изображено на вставке рис. 1.

Первично для определения толщины каскадов гетероструктур использовалось преобразование Фурье кривой рефлектометрии [14], результаты которого отображены в зависимости от глубины на рис. 2. По наблюдаемым фурье-образам прослеживаются достаточно выраженные пики вплоть до толщины ~ 300 нм. Недоступность для анализа большей толщины связана, с одной стороны, с малой интенсивностью отражения излучения от глубоко лежащих интерфейсов, а с другой — с угловым шагом сканирования при измерении. Таким образом, метод рентгеновской рефлектометрии позволяет анализировать параметры верхних каскадов, в то время как с использованием метода рентгеновской дифрактометрии

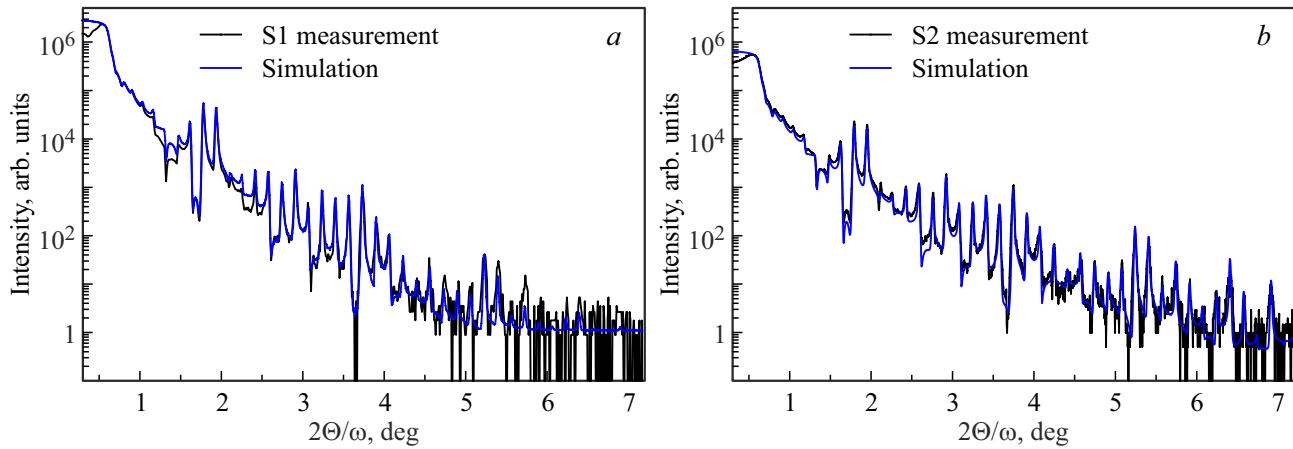


Рис. 3. Результаты моделирования кривой рентгеновской рефлектометрии гетероструктур S1 (a) и S2 (b).

возможно исследование всей толщины гетероструктуры. По положению наблюдаемых на рис. 2 равноудаленных друг от друга пиков можно судить о высокой точности воспроизведения толщины каскадов. Рассчитанные по наиболее интенсивному пику фурье-образа толщины каскадов составили 52.7 и 52.8 нм, что соответствует отклонениям от номинальных значений на 0.5 и 0.6 нм для гетероструктур S1 и S2 соответственно.

Для количественной оценки шероховатости интерфейсов гетероструктуры было произведено моделирование кривых рентгеновской рефлектометрии на основе уравнений Паратта [15,16]. Интенсивность отраженного излучения X_j от интерфейса слоя j описывается рекуррентной формулой:

$$X_j = \left(\exp \frac{-i\pi R_{j+1} t_{j+1}}{\lambda} \right)^4 \cdot \frac{X_{j-1} + R_{j+1}}{1 + X_{j-1} R_{j+1}}; \quad (2)$$

$$R_j = \frac{r_j - r_{j+1}}{r_j + r_{j+1}} \exp(-2r_j r_{j+1} \sigma_{j+1}); \quad (3)$$

$$r_j = \sqrt{\omega^2 - 2\delta_j - i2\beta_j}, \quad (4)$$

где R_j — коэффициент отражения, t — толщина, ω — угол падения излучения, δ и β — составляющие комплексного показателя преломления слоя, σ_{j+1} — среднеквадратичное значение шероховатости интерфейса слоя с индексом $j+1$. При моделировании производился подбор толщин и шероховатости слоев, обеспечивающих наилучшее соответствие экспериментальных и смоделированных кривых. Для всех интерфейсов гетероструктуры принималась равная среднеквадратичная шероховатость σ_{int} . Среднеквадратичная шероховатость поверхности гетероструктуры σ_{surf} подбиралась независимо от σ_{int} . Результаты моделирования кривых рентгеновской рефлектометрии представлены на рис. 3.

Определенные в результате моделирования кривых рефлектометрии параметры представлены в табл. 1. Полученные результаты демонстрируют значительное,

Таблица 1. Параметры шероховатости и толщины, определенные при моделировании кривой рефлектометрии гетероструктур S1 и S2

Образец	σ_{int} , нм	σ_{surf} , нм	Толщина каскада, нм
S1(P1)	0.55	0.59	52.7 ± 0.1
S2(P2)	0.32	0.31	52.7 ± 0.1

в 1.7–1.9 раза, уменьшение среднеквадратичной шероховатости поверхности и интерфейсов гетероструктуры при использовании подложки P2.

Определенные методами моделирования и фурье-преобразования толщины каскадов сверхрешетки показывают отсутствие существенных различий между гетероструктурами S1 и S2. Полученные значения находятся в диапазоне погрешности толщин, определенных по положению толщинных осцилляций на кривой рентгеновской дифрактометрии (52.3 ± 1.0 нм и 52.5 ± 0.9 нм для S1 и S2 соответственно). При сопоставлении результатов измерений следует рассматривать рентгеновскую рефлектометрию как более точный метод определения толщины каскадов гетероструктуры ККЛ с учетом максимальной доступной для анализа глубины, не превышающей 300 нм.

Согласно результатам измерений, методом оптической дефектометрии, представленным в табл. 2, обе подложки P1 и P2 характеризуются низким уровнем плотности точечных дефектов поверхности. Вместе с тем подложка P1 обладает более высокой шероховатостью поверхности по сравнению с подложкой P2. Анализ поверхности темплейтов показал незначительное увеличение исходных плотности точечных дефектов и шероховатости в результате МОГФЭ зашивания подложек. Полученные результаты измерений являются типичными для серии аналогичных подложек и темплейтов, изготовленных в различных (более трех) ростовых

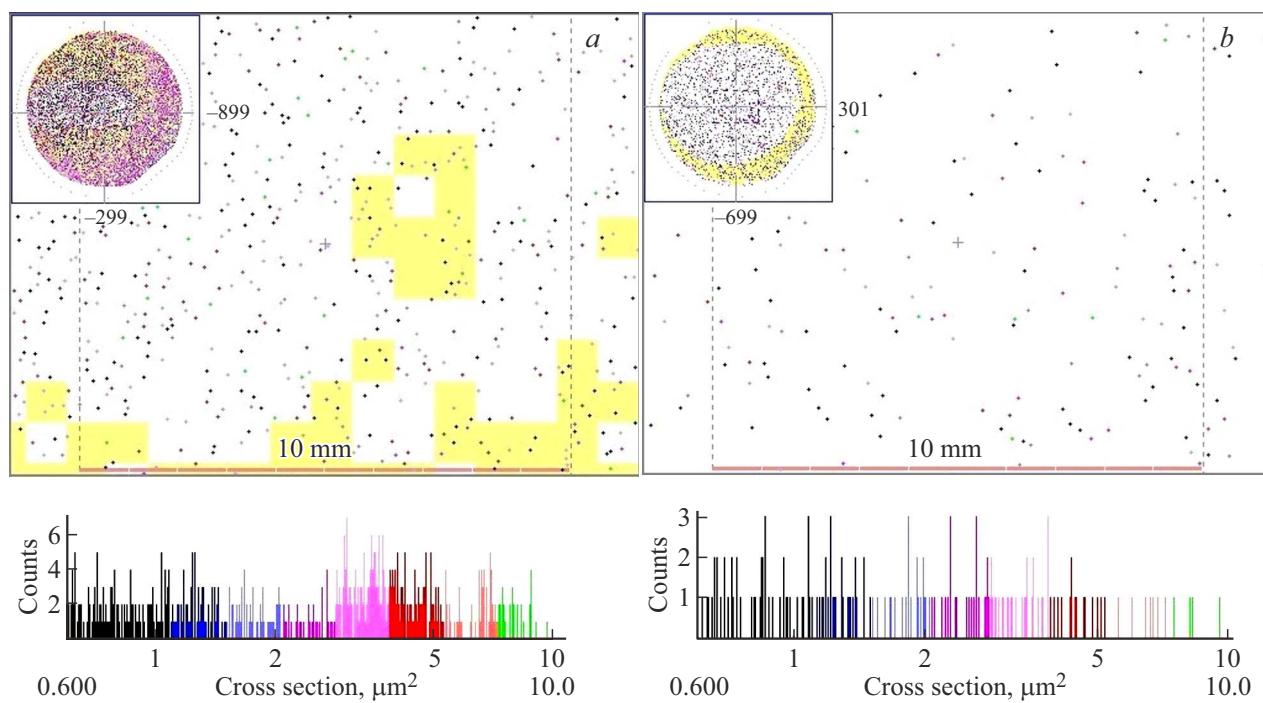


Рис. 4. Карта поверхностных дефектов центральной области тестовой гетероструктуры S1 (a) и S2 (b) в диапазоне измерений $0.6-10 \text{ мкм}^2$.

Таблица 2. Плотность точечных дефектов и шероховатость поверхности образцов, определенные методом оптической дефектометрии

Образец	Диапазон $0.6-10 \text{ мкм}^2$			Диапазон $10-250 \text{ мкм}^2$		
	Плотность дефектов, ед./ см^2	$haze$, ppm, млн^{-1}	σ_{optic} , нм	Плотность дефектов, ед./ см^2	$haze$, ppm, млн^{-1}	σ_{optic} , нм
P1	0.063	38.8	0.42	0.063	18.80	0.30
P2	1.57	6.74	0.18	1.19	1.09	0.07
T1(P1)	1.89	40.6	0.43	0.377	19.6	0.30
T2(P2)	1.95	7.18	0.18	2.33	1.36	0.08
S1(P1)	549	94.0	0.56	9.12	63.2	0.46
S2(P2)	126	86.6	0.53	6.54	62.6	0.45

процессах. При исследовании гетероструктур выявлено, что образец S2 характеризуется в ~ 1.5 раза меньшей плотностью точечных дефектов в диапазоне измерения $10-250 \text{ мкм}^2$ и более чем в 4 раза меньшей плотностью дефектов в диапазоне измерения $0.6-10 \text{ мкм}^2$ по сравнению с образцом S1.

При анализе шероховатости гетероструктур S1 и S2 не наблюдается значительных различий, выявленных методом рентгеновской рефлектометрии. Причина наблюдаемого несоответствия может заключаться в неравномерности распределения шероховатости поверхности по площади гетероструктуры. Как видно из карт распределения плотности точечных дефектов, изображенных на рис. 4, наибольшее значение $haze$ наблюдается вблизи краев гетероструктуры. Однако при измерении методом рентгеновской рефлектометрии рентгеновский

лучок направлен в центр пластины. При малых углах сканирования, вблизи критического угла полного отражения, длина области облучения может составлять ~ 10 мм. Поэтому для более корректного сравнения результатов методом оптической дефектометрии были исследованы центральные области пластин размером 10×10 мм. Результаты измерений сведены в табл. 3, карты распределений плотности дефектов центральной области гетероструктур представлены на рис. 4. Определено, что плотность точечных дефектов поверхности в центральной части гетероструктур приблизительно равна соответствующему значению по всей площади пластины. Исследование параметра $haze$ в центральной части пластины показало отсутствие шероховатости, фиксируемой в диапазоне $10-250 \text{ мкм}^2$. При измерении в диапазоне $0.6-10 \text{ мкм}^2$ среднеквадратичная шерохова-

Таблица 3. Плотность точечных дефектов и шероховатость поверхности в центральной области гетероструктур S1 и S2

Образец	Диапазон 0.6–10 мкм ²			Диапазон 10–250 мкм ²		
	Плотность дефектов, ед./см ²	haze, ppm, млн ⁻¹	σ_{optic} , нм	Плотность дефектов, ед./см ²	haze, ppm, млн ⁻¹	σ_{optic} , нм
S1(P1)	519	44	0.38	7.56	0	0
S2(P2)	143	12.3	0.20	9.24	0	0

тость оценена значениями 0.38 и 0.20 нм для гетероструктур S1 и S2 соответственно. Несмотря на то что абсолютные значения среднеквадратичной шероховатости, полученные методом оптической дефектометрии, несколько ниже, чем аналогичные показатели, определенные методом рентгеновской рефлектометрии, относительная разница значений между образцами S1 и S2 составляет около 2 раз и коррелирует с результатами, полученными методом рентгеновской рефлектометрии. Вследствие этого метод оптической дефектометрии может использоваться для оценки шероховатости поверхности гетероструктуры. Тем не менее при сопоставлении результатов с данными рентгеновской рефлектометрии следует принимать во внимание неравномерный характер распределения шероховатости по пластине.

Отмеченное влияние качества подложек на плотность дефектов и шероховатость интерфейсов сверхрешеток было подтверждено при анализе гетероструктур S3 и S4 методом оптической дефектометрии. Гетероструктуры были выращены на темплейтах, аналогичных T1 и T2 соответственно. Сверхрешетки гетероструктур состояли из 10 каскадов $\text{In}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{As}/\text{In}_{0.37}\text{Al}_{0.63}\text{As}$ толщиной 3.6/1.4/3.8/1.3/4.3/1.3/1.2/3.8/1.8/2.7/1.8/2.1/2.0/2.1/2.1/1.9/2.2/1.8/2.5/1.7/2.8/2.2 нм. В отличие от образцов S1 и S2 гетероструктуры были выращены методом МПЭ в едином эпитаксиальном процессе. Плотность точечных дефектов гетероструктуры S4 определена в 2.6–6.9 раза меньше, а среднеквадратичная шероховатость — на 56 % ниже по сравнению с гетероструктурой S3. Схожие с образцом S3 шероховатость и плотность дефектов были получены при последовательной эпитаксии двух аналогичных S3 гетероструктур.

Таким образом, было показано, что заращивание подложек методом МОГФЭ слоем InP толщиной 5000 нм не обеспечивает полной планаризации эпитаксиальной поверхности. В результате шероховатость интерфейсов активной области ККЛ в значительной мере определяется исходной шероховатостью подложки. При исследовании качества интерфейсов гетероструктуры методом рентгеновской рефлектометрии было выявлено, что использование подложки P2 приводит к снижению среднеквадратичной шероховатости поверхности гетероструктуры в 1.7–1.9 раза по сравнению с подложкой P1. Среднеквадратичная шероховатость интерфейсов гетероструктуры на подложке P2 составила ~ 0.3 нм. Измерения методом оптической дефектометрии также подтвердили меньшую шероховатость поверхности гете-

роструктуры, выращенной на подложке P2, и показали снижение плотности точечных дефектов в 1.5–4.0 раза по сравнению с гетероструктурой, выращенной на подложке P1.

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-72-30020-П, <https://rscf.ru/project/21-72-30020/>

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] A.Yu. Egorov, A.V. Babichev, L.Yu. Karachinsky, I.I. Novikov, E.V. Nikitina, M. Tchernycheva, I.S. Tarasov. Semiconductors, **49** (11), 1527 (2015).
- [2] A.V. Babichev, A. Bousseksou, N.A. Pikhtin, I.S. Tarasov, E.V. Nikitina, A.N. Sofronov, A.Yu. Egorov. Semiconductors, **50** (10), 1299 (2016).
- [3] A.V. Babichev, A.S. Kurochkin, E.S. Kolodeznyi, A.V. Filimonov, A.A. Usikova, V.N. Nevedomsky, A.Yu. Egorov. Semiconductors, **52** (6), 745 (2018).
- [4] Y. Zhao, J. Zhang, C. Cai, J. Chen, X. Zhao, C. Liang, R. Che. ACS Appl. Mater. Interfaces, **12** (37), 41950 (2020).
- [5] Y. Chiu, Y. Dikmelik, P.Q. Liu, N.L. Aung, J.B. Khurigin, C.F. Gmachl. Appl. Phys. Lett., **101** (17), 171117 (2012).
- [6] C. Boyle, K.M. Oresick, J.D. Kirch, Y.V. Flores, L.J. Mawst, D. Botez. Appl. Phys. Lett., **117** (5), 051103 (2020).
- [7] J.B. Khurigin, Y. Dikmelik, P.Q. Liu, A.J. Hoffman, M.D. Escarra, K.J. Franz, C.F. Gmachl. Appl. Phys. Lett., **94** (9), 091101 (2009).
- [8] Y.V. Flores, S.S. Kurlov, M. Elagin, M.P. Semtsiv, W.T. Masselink. Appl. Phys. Lett., **103** (16), 161102 (2013).
- [9] K.A. Krivas, D.O. Winge, M. Francké, A. Wacker. J. Appl. Phys., **118** (11), 114501 (2015).
- [10] M. Adamcyk, T. Pinnington, A. Ballestad, T. Tiedje. Mater. Sci. Eng. B, **75** (2-3), 153 (2000).
- [11] L. Cheng, J. Fan, D. Janssen, D. Guo, X. Chen, F.J. Towner, F.S. Choa. J. Electron. Mater., **41** (3), 506 (2012).
- [12] E. Chason, T.M. Mayer. Crit. Rev. Solid State Mater. Sci., **22** (1), 1 (1997).
- [13] A. Steinbach, U. Subramaniam. *Be market ready* (KLA-Tencor Corporation, 2006) v. 66.
- [14] M. Lammel, K. Geishendorf, M.A. Choffel, D.M. Hamann, D.C. Johnson, K. Nielsch, A. Thomas. Appl. Phys. Lett., **117** (21), 213104 (2020).

- [15] L.G. Parratt. Phys. Rev., **95** (2), 359 (1954).
[16] P.F. Fewster. Rep. Progr. Phys., **59**, 1339 (1996).

Редактор Г.А. Оганесян

Influence of the morphology of InP substrates on interface roughness and defect density of quantum-cascade laser heterostructures

*D.S. Papylev¹, I.I. Novikov^{1,2}, V.V. Andryushkin^{1,2},
A.G. Gladyshev², V.V. Dudelev³, L.Ya. Karachinsky^{1,2},
A.V. Babichev¹, I.A. Nyapshaev³,
A.Yu. Egorov^{2,3}, G.S. Sokolovskii³*

¹ ITMO University,
197101 St. Petersburg, Russia

² Connector Optics LLC,
194292 St. Petersburg, Russia

³ Ioffe Institute,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract The influence of InP substrate of different manufacturers on the structural properties of quantum-cascade laser heterostructures produced by molecular-beam epitaxy on metal-organic chemical vapor deposition templates was studied. A reduction in the root mean square interface roughness by 42–47% as well as a decrease in surface defect density by a factor of 1.5–4.0 were demonstrated by using one type of substrate despite equal nominal substrate characteristics. The results confirm the critical importance the initial substrate quality in reducing the density of point defects and the roughness of the interfaces of quantum cascade lasers heterostructures.