

Исследование квантовых ям $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ методами низкотемпературной фотолюминесценции и рентгеновской дифрактометрии

© С.В. Евстигнеев, Р.М. Имамов⁺, А.А. Ломов⁺, Ю.Г. Садофьев[¶],
Ю.В. Хабаров^{*}, М.А. Чуев⁼, Д.С. Шипицин

Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук,
117924 Москва, Россия

⁺ Институт кристаллографии Российской академии наук,
117333 Москва, Россия

^{*} Институт радиотехники и электроники Российской академии наук,
103907 Москва, Россия

⁼ Физико-технологический институт Российской академии наук,
117218 Москва, Россия

(Получена 14 июля 1999 г. Принята к печати 25 ноября 1999 г.)

Методами рентгеновской дифрактометрии и низкотемпературной фотолюминесценции исследованы структуры с квантовыми ямами $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ в GaAs , полученные эпитаксией из молекулярных пучков. Установлена неоднородность состава квантовых ям по толщине. Проведен расчет энергетического положения линий рекомбинации экситонов в квантовых ямах со ступенчатым профилем распределения индия, результаты которого хорошо согласуются с экспериментом.

1. Введение

Основной объем работ по созданию и исследованию структур с единичными или множественными гетеропереходами, таких как гетероструктуры с селективным легированием, квантовыми ямами и сверхрешетками, выполнен на основе арсенидов галлия и алюминия [1]. По параметрам кристаллических решеток эти два материала представляют собой почти идеальную гетеропару, что позволяет получать структуры высокого качества. Однако использование других материалов может значительно улучшить характеристики существующих приборов и расширить их функциональные возможности. В последнее время широкое распространение получили структуры с напряженными слоями $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, ограниченными барьерами из GaAs или AlGaAs . Применение слоев $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ в качестве квантовых ям позволяет повысить эффективность ограничения носителей на уровнях размерного квантования, а также изменять оптические характеристики гетероструктур [2,3]. Так, использование $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ в качестве канала транзистора с высокой подвижностью электронов (НЕМТ) позволило получить в одной из последних работ [4] максимальную крутизну 1510 мСм/мм и частоту отсечки 220 ГГц, что является одним из лучших достижений для НЕМТ. Создание приконтактных варизонных слоев $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ позволяет делать неплавные омические контакты, что существенно упрощает технологию изготовления схем с высокой степенью интеграции [5]. Нами была предложена оригинальная методика создания независимых омических контактов к квантовым ямам изотипной проводимости в двухъямной гетероструктуре, основанная на использовании квантовых ям различного состава, в том числе $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [6].

Столь широкое применение напряженных InGaAs -гетероструктур требует полномасштабных исследований свойств получаемых образцов с целью оптимизации технологических режимов формирования In -содержащих слоев и границ раздела. Другая задача состоит в идентификации зонной диаграммы структур с гетеропереходами InGaAs-AlGaAs или квантовыми ямами, что является необходимым условием создания приборов с заданными характеристиками. В частности, при отработке технологии получения квантово-размерных слоев InGaAs необходимо знать основные параметры слоев, такие как молярная доля индия и толщина слоя. Для контроля этих параметров *ex situ* в квантово-размерных структурах обычно используют метод фотолюминесценции (ФЛ). При этом энергетическое положение доминирующей в спектре линии фотолюминесценции, обусловленной рекомбинацией электронно-дырочных пар в квантовой яме, соответствует разности энергий основных состояний размерного квантования для электронов в зоне проводимости E_{e1} и тяжелых дырок в валентной зоне E_{hh1} с поправкой на энергию связи экситона. Оно зависит от ширины квантовой ямы, ее состава и энергии связи экситона, образующегося в квантовой яме. В силу этого энергетическое положение линии фотолюминесценции не несет однозначной информации о конфигурации конкретной квантовой ямы. Часто наблюдается уширение пиков ФЛ, и требуется детальное знание причин этого явления. Кроме того, нет устоявшихся оценок параметров зонной диаграммы структур InGaAs-AlGaAs . Эта проблема на сегодняшний день не решена по причине большого рассогласования постоянных решетки используемых соединений (7% для InAs и GaAs) и возникающих вследствие этого механических напряжений. В литературе отсутствует полная информация по упругим константам $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и их зависимостям от молярной

[¶] E-mail: sadofyev@sci.lebedev.ru

Таблица 1. Параметры квантовых ям — технологические и по данным рентгеновской дифрактометрии

Образцы	МЛЭ			КДО							
	d , нм	x	T_s , °C	d_1 , нм	x_1	d_2 , нм	x_2	d_3 , нм	x_3	Σd_i , нм	$\langle x \rangle$
A	13.5	0.08	580	3.3 ± 0.1	0.037 ± 0.004	10.0 ± 0.3	0.071 ± 0.001	1.3 ± 0.2	0.043 ± 0.003	14.6 ± 0.6	0.061 ± 0.002
B	13.5	0.17	555	3.38 ± 0.08	0.10 ± 0.03	10.0 ± 0.1	0.165 ± 0.005	—	—	13.4 ± 0.2	0.149 ± 0.005
C	11.5 3.0 6.0	0.17 0.17 0.25	535 535 500	Расчет не проводился							

доли индия и температуры, что делает невозможным теоретический расчет ширины запрещенной зоны напряженной квантовой ямы. Для расчета свойств свободных носителей в таких гетероструктурах необходимо также знание величин разрывов зоны проводимости ΔE_c и валентной зоны ΔE_v в области гетероперехода и характера зависимости этих величин от состава ямы. Обычно ширина запрещенной зоны квантовой ямы $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ выбирается из условия ее линейной зависимости от молярной доли индия с коэффициентом, равным разности ширин запрещенных зон ΔE_g объемных материалов при фиксированной температуре. Отношение $\Delta E_c/\Delta E_g$ различается в разных работах от 0.55 до 0.85 [7–9]. В связи с этим желательнее использовать для уточнения результатов фотолюминесцентных измерений иные способы неразрушающего контроля квантово-размерных гетеросистем.

Для нахождения основных параметров квантовых ям $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ различной ширины и с различной молярной долей индия, выращенных молекулярно-лучевой эпитаксией (МЛЭ) и ограниченных барьерами из GaAs, нами проведены комплексные исследования структур методами фотолюминесценции и двухкristальной рентгеновской дифрактометрии. Проведены также расчеты энергий переходов $e1-hh1$ выращенных квантовых ям с помощью эмпирического выражения для величины запрещенной зоны квантовой ямы $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ в зависимости от молярной доли индия. Результаты расчета спектров ФЛ с учетом энергии связи экситона в двумерном слое хорошо согласуются с экспериментальными данными при параметрах квантовых ям, определенных из кривых дифракционного отражения (КДО).

2. Выращивание образцов

Образцы, содержащие квантовые ямы, выращивались на установке МЛЭ "Цна-18" на подложках полужолирующего GaAs (001) с разориентацией 3° в направлении [110]. Были выращены две структуры с одиночной квантовой ямой — образцы A и B, а также структура с тремя квантовыми ямами — образец C. Исходя из измеренных зависимостей эквивалентных давлений молекулярных пучков Ga и In от температуры соответствующих

молекулярных источников и калибровок по скоростям роста слоев GaAs и InAs молярная доля индия (x) в различных квантовых ямах должна была изменяться от 0.08 до 0.25, а ширины квантовых ям (d) — от 3 до 13.5 нм. Основное внимание было уделено относительно широким квантовым ямам с $x \approx 0.2$, которые могут использоваться в полевых транзисторах различных типов. В связи с этим для обеспечения высокой проводимости таких двумерных каналов температуры роста In-содержащих слоев превышали обычно используемые значения на $30-40^\circ\text{C}$. При этом в структуре псевдоморфного НЕМТ с единственным легированным барьерным слоем, расположенным над In-содержащей квантовой ямой, были получены подвижности двумерного электронного газа 5700 и $37000 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ при температурах $T = 300$ и 77 К соответственно и слоевой концентрации электронов $n_s = 2.4 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$.

Для предотвращения диффузии примесей и дефектов из подложки в активную часть гетероструктуры во всех образцах сначала создавался буферный слой GaAs толщиной 0.5 мкм . Квантовые ямы из InGaAs отделялись от поверхности пленки или друг от друга слоем GaAs толщиной 500 нм . Структуры в процессе роста не подвергались преднамеренному легированию. Температура подложки при росте GaAs составляла 610°C , скорость роста GaAs — 0.6 мкм/ч , отношение эквивалентных давлений потоков As и Ga — $20:1$. При формировании обеих границ слоев из $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ проводилось прерывание роста в течение 90 с в потоке мышьяка для выглаживания границ раздела и изменения температуры подложки, которую сначала понижали до определенной температуры, зависящей от состава квантовой ямы, а после выращивания слоев $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ вновь повышали до 610°C . Картины дифракции быстрых электронов на различных этапах технологического процесса формирования структур отставались стержнеобразными, без выраженной модуляции интенсивности по длине рефлексов. Для исключения термодесорбции из приповерхностного слоя и минимизации возможной термостимулированной сегрегации атомов индия прерывание роста на верхней границе раздела квантовой ямы с повышением температуры подложки производилось после осаждения трех монослоев GaAs. Данная операция не использовалась

при выращивании образца *B*. Ожидаемые параметры квантовых ям $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и соответствующие им температуры роста T_s представлен в табл. 1 (колонка МЛЭ).

3. Рентгенодифракционные исследования

Исследование структурных параметров слоев проводилось методом двухкristальной рентгеновской дифрактометрии. Измерения выполнялись на трехкristальном рентгеновском спектрометре ТРС-1. Прибор работал в автоматическом режиме с использованием персонального компьютера и контроллера МАТЕХ. Кривые дифракционного отражения от образцов регистрировались при отражении (004) в режиме $\omega/(1 + \beta)\theta$ -сканирования (β — коэффициент асимметрии) с установленной перед детектором узкой щелью (8 угл. мин). Эта же схема была использована в режиме θ -сканирования для измерения вклада диффузного рассеяния в КДО. Источником излучения служила рентгеновская трубка с медным анодом мощностью 1.1 кВт. Рентгеновский пучок, падающий на образец, формировался щелевым с трехкратным отражением монохроматором из совершенного монокристалла Ge (004). Регистрация КДО выполнялась в пошаговом режиме по заданной статистике сигнала в каждой точке

измерения. Остальные детали методики эксперимента аналогичны описанным в [10].

Экспериментальные КДО от образцов *A* и *B* представлены на рис. 1, *a, b* соответственно. Наблюдаемые на них особенности качественно легко описываются. Видно, что кроме основного дифракционного максимума при $\Delta\theta = \theta - \theta_B = 0$ (θ_B — угол Брэгга) на хвостах КДО наблюдается сложная интерференционная картина, представляющая собой наложение двух волн с отличающимися периодами колебаний. Осцилляции с малым периодом свидетельствуют о наличии на поверхности образца пленки толщиной

$$L = (\lambda \sin \theta_0) / \Delta\theta \sin 2\theta_B \approx 0.1 \text{ мкм}, \quad (1)$$

где λ — длина волны рентгеновского излучения, θ_0 — угол скольжения.

Осцилляции с большим периодом имеют ярко выраженный максимум, что свидетельствует о формировании в приповерхностной области образцов монокристаллического слоя толщиной ~ 0.01 мкм, отличающегося от подложки параметром решетки (различие параметров решетки $\Delta a = -a_0(\text{ctg } \theta_B)\Delta\theta$, a_0 — параметр решетки подложки). Анализ КДО, записанных от асимметричных отражений, показал, что выращенные слои являются псевдоморфными. С учетом этого факта было оценено среднее содержание атомов In в квантовой яме. Такие оценки приводят к значениям $x = 0.07$ и 0.17 для образцов *A* и *B* соответственно.

Для количественного описания КДО и получения детальной информации о параметрах структуры отдельных слоев и гетерограниц был использован метод, развитый в [11]. В качестве начального приближения при анализе экспериментальных кривых отражения использовались параметры структуры, заложенные в технологии их выращивания. Затем находились модели, для которых расчетные КДО наилучшим образом описывали экспериментальные данные. Следует отметить, что данный метод анализа позволяет не только выбрать оптимальную модель, но и определить ошибки извлекаемых параметров для каждого слоя в образце. Подгонка расчетных кривых к экспериментальным заканчивалась, когда значения среднеквадратичных ошибок параметров превышали их средние значения.

Для модели с резкими границами были получены расчетные КДО, визуально слабо отличающиеся от экспериментальных. Однако полученные результаты нельзя было считать удовлетворительными, поскольку величины функционала χ^2 [10] сильно отличались от единицы. Поэтому на следующем этапе анализа в расчет были введены дополнительные субслои, характеризующие размытие гетерограниц, что позволило уменьшить χ^2 до 1.28 для образца *A* и до 1.33 для образца *B*. При этом визуально расчетные и экспериментальные кривые КДО уже практически невозможно различить. Этот результат иллюстрирует представленные в нижних частях рис. 1, *a, b* нормировочные разности δ , почти все значения которых хорошо укладываются в теоретически предсказываемый интервал $(-3) - (+3)$.

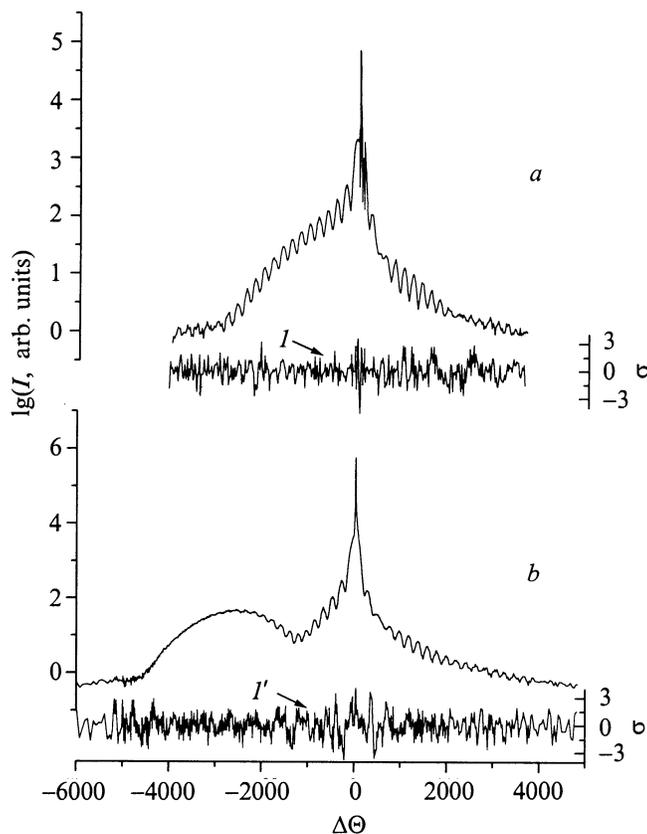


Рис. 1. Кривые дифракционного отражения от гетероструктур $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$: *a* — образец *A* ($\chi^2 = 1.28$), *b* — образец *B* ($\chi^2 = 1.33$). I и I' — нормированные ошибки σ . I — интенсивность.

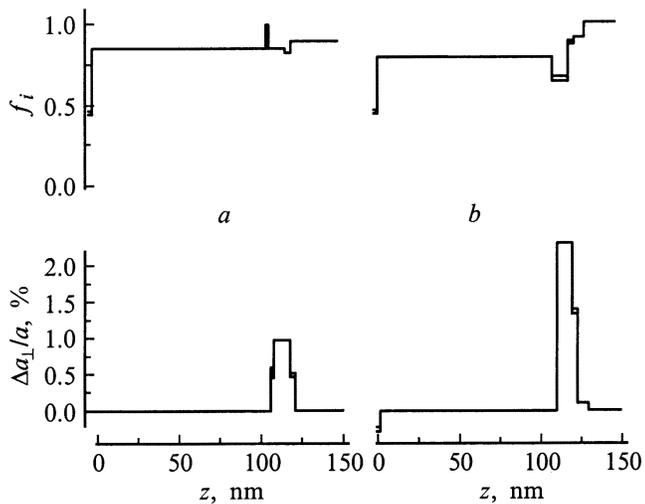


Рис. 2. Профили распределения по глубине z статистического фактора Дебая–Валлера f_i и изменения параметра решетки в перпендикулярном к поверхности направлении $\Delta a_{\perp}/a$ для образцов A (a) и B (b).

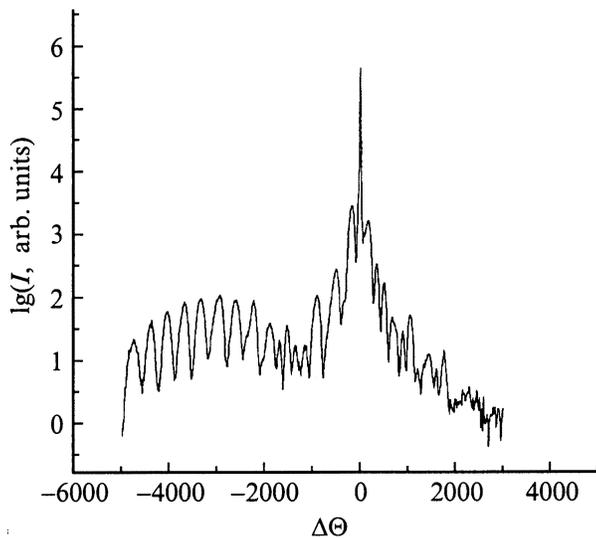


Рис. 3. Кривая дифракционного отражения для образца C . I — интенсивность.

На рис. 2, a, b представлены профили распределения деформации $\Delta a_{\perp}/a$ и аморфизации f_i по глубине для образцов A и B соответственно.

Структура квантовых ям такова, что верхние границы между ними и слоем GaAs являются достаточно резкими, в то время как нижние размыты на ~ 3 нм в глубину образца. Содержание атомов In (или изменение межплоскостного расстояния) в размытых областях в ~ 1.5 и 2 раза (соответственно для образцов A и B) меньше, чем в неразмытых областях квантовых ям. Полученные параметры $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -слоев (толщины и содержание индия) для образцов A и B приведены в табл. 1 (колонка КДО). Видно, что квантовая яма образца A эффективно состоит из трех субслоев, а аналогичный слой образца

B — из двух. Индексы 1, 2 и 3 в табл. 1 поставлены в порядке следования соответствующих областей квантовых ям от подложки к поверхности эпитаксиальной пленки. В последних двух столбцах колонки КДО указаны общая ширина и средневзвешенное содержание In в слое $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Эти значения хорошо согласуются с параметрами, заложенными в технологии выращивания.

Модели для образцов A и B наиболее сильно различаются по средней величине степени упорядочения атомов в кристаллической решетке f_i основного слоя квантовой ямы. Значение параметра $f_i = 0.85$ для квантовой ямы образца A более чем на $1/3$ превышает $f_i = 0.62$ для квантовой ямы образца B (рис. 2, b). Это означает, что In-содержащий слой в образце A более совершенен по структуре по сравнению с аналогичным слоем в образце B . Этот факт подтверждается еще и тем обстоятельством, что величина интенсивности диффузного рассеяния в области углов θ , соответствующих отражению от кристаллической решетки $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, больше у образца B , а интерференционные максимумы этого образца (рис. 1, b) со стороны углов $\Delta\theta < 0$ быстрее спадают.

Кривая дифракционного отражения для образца C приведена на рис. 3. На ней наблюдается большое число осцилляций, что подтверждает наличие выраженной многослойной гетероструктуры вблизи поверхности. При необходимости, используя метод минимизации функционала χ^2 [10], можно получить обширную информацию о параметрах слоев в образце.

4. Фотолюминесценция

Измерения ФЛ проводились при температуре жидкого азота с возбуждением от Ar^+ -лазера на длине волны 488 нм. Возбуждающее излучение формировалось в пятно диаметром ~ 50 мкм. Максимальная плотность возбуждения составляла 200 Вт/см². Спектры регистрировались при помощи монохроматора МДР-23 и охлаждаемого фотоумножителя ФЭУ-62 в режиме счета фотонов.

В спектрах ФЛ $I_{\text{PL}}(E)$ образцов A, B и C , представленных на рис. 4, a, b , наблюдаются интенсивные и вместе с тем относительно широкие полосы, соответствующие рекомбинации экситонов $e1-hh1$ в квантовых ямах. Энергии максимумов полос E_{e1-hh1} и их ширина на полувысоте представлены в табл. 2 (колонка ФЛ). Уширение полос ФЛ может являться следствием как несовершенства границ раздела (квантовая яма)–барьер, приводящего к флуктуациям ширины квантовой ямы, так и неоднородностью состава по глубине квантовых ям. Присутствие таких нарушений подтверждается результатами рентгенодифракционных исследований, на основании которых в большей степени размытой (и обедненной индием) является нижняя гетерограница.

Следует отметить высокую интенсивность излучательной рекомбинации I_{PL} от слоев InGaAs , превышающую на 2 порядка сигнал от барьерных слоев даже для пика ФЛ наименьшей амплитуды (образец C — квантовая яма шириной 3 нм).

Таблица 2. Параметры квантовых ям по данным фотолюминесценции

Образцы	ФЛ		Расчет 1		Расчет 2						
	E_{e1-hh1} эВ	Ширина пика, мЭВ	d , нм	x	d_1 , нм	x_1	d_2 , нм	x_2	d_3 , нм	x_3	Σd_i , нм
A	1.4391	9	14.6	0.064	3.3	0.033	10.0	0.07	1.3	0.04	14.6
B	1.3306	21	13.4	0.175	3.4	0.01	10.0	0.17			13.4
C	1.3272	12	11.0	0.17	1.6	0.11	10.0	0.175			11.6
	1.4459	13	3.0	0.14	1.6	0.11	1.4	0.175			3.0
	1.2999	25	6.0	0.24	1.0	0.17	5.0	0.25			6.0

5. Расчет энергии фотолюминесцентного перехода E_{e1-hh1} и определение параметров квантовых ям

Поскольку выращенные образцы содержали преимущественно широкие квантовые ямы, основные уровни размерного квантования в которых находятся вблизи краев соответствующих разрешенных зон, высоты потенциальных барьеров, а значит, и выбор конкретного значения $\Delta E_c/\Delta E_g$ не существенны для расчета энергетического положения пика ФЛ. Для определенности было выбрано среднее значение параметра $\Delta E_c/\Delta E_g$ из упоминаемых в литературе, равное 0.7. Энергия рекомбинации экситона в квантовой яме определялась суммированием ширины запрещенной зоны $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ при температуре 77 К и положений уровней размерного квантования, соответствующих $e1$ и $hh1$ и отсчитанных от краев соответствующих зон, за вычетом энергии связи экситона. Зависимость ширины запрещенной зоны $E_g(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})$ от содержания индия в основном описывается полиномом 2-го порядка [12–14]. Коэффициенты полинома для членов 1-го и 2-го порядка брались из [15], а за начало отсчета было выбрано значение ширины запрещенной зоны для GaAs при 77 К, равное 1.508 эВ:

$$E_g[\text{эВ}] = 1.508 - 1.214x + 0.264x^2. \quad (2)$$

Положение первых уровней размерного квантования для электронов и тяжелых дырок находились численно с помощью уравнения Шредингера, которое решалось в одноэлектронном приближении в рамках метода огибающей волновой функции. Эффективные массы носителей заряда (электронов и тяжелых дырок) считались одинаковыми для всех слоев структуры и равными соответствующим значениям в квантовой яме, рассчитанным из соотношений

$$\begin{aligned} m_e^* &= 0.0665 - 0.0642x, \\ m_{hh}^* &= 0.62 - 0.22x. \end{aligned} \quad (3)$$

Для решения использовался метод матрицы переноса. Форма квантовой ямы считалась прямоугольной с резкими границами. При расчете энергии люминесцентных

переходов квантовых ям образцов A и B в первом приближении в качестве параметров использовались значения, определенные по КДО (суммарная ширина слоя InGaAs и содержание индия, вычисленное как средневзвешенное значение всех составляющих квантовую яму областей). Для образца C расчет E_{e1-hh1} проводился с параметрами квантовых ям, взятыми из табл. 1 (колонка МЛЭ).

Энергия связи экситона $e1-hh1$ выращенных квантовых ям варьируется в пределах 6–9 мЭВ, где максимальная величина соответствует слою $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ толщиной 3 нм [16,17]. Для большинства квантовых ям это значение составляет 7 ± 1 мЭВ. Поэтому среднее значение энергии связи экситона, равное 7 мЭВ, для расчета всех пиков ФЛ является хорошим приближением.

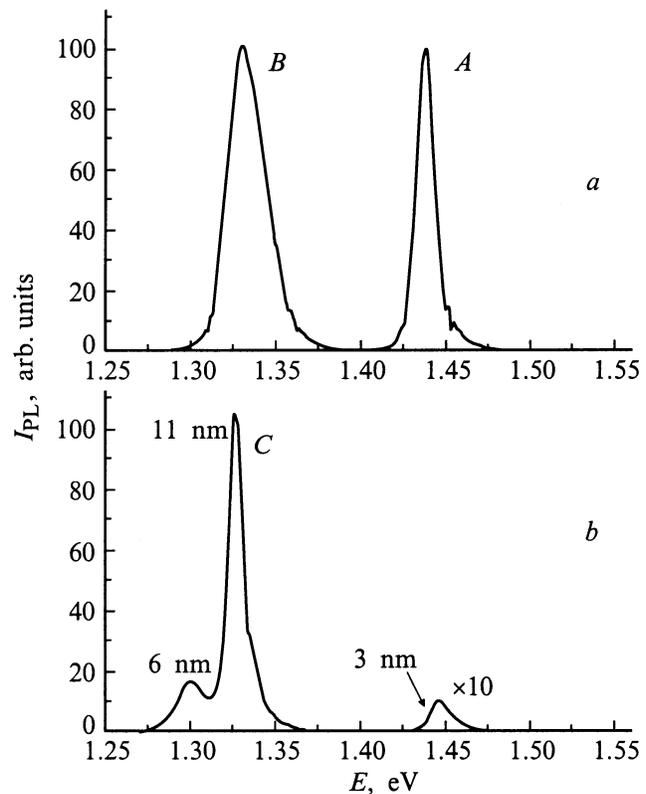


Рис. 4. Спектры фотолюминесценции исследуемых образцов: a — структуры A и B с одиночными квантовыми ямами; b — структура C с тремя квантовыми ямами. $T = 77$ К.

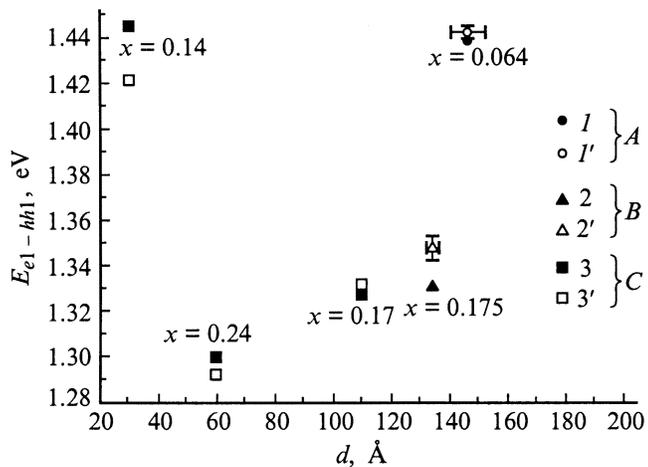


Рис. 5. Экспериментальные энергии рекомбинации экситонов $e1-hh1$ в квантовых ямах исследуемых образцов ($I-3$) и соответствующие расчетные значения для модели прямоугольных ям ($I'-3'$).

На рис. 5 символами ($I-3$) показаны экспериментальные результаты, а ($I'-3'$) — рассчитанные значения E_{e1-hh1} для образцов A , B и C . Погрешности расчета параметров квантовых ям для образцов A и B соответствуют указанным в табл. 2 погрешностям определения средневзвешенных параметров ям из КДО. Из рисунка видно, что удовлетворительное совпадение результатов расчета с энергетическим положением пиков ФЛ имеет место для образца A и образцов C с широкой квантовой ямой. Расхождение данных для образца B и образца C с узкой ямой (3 нм) весьма значительное. Возможной причиной этого является неоднородность распределения индия в квантовых ямах. Следует отметить, что экспериментально наблюдаемые энергии переходов $e1-hh1$ дают заниженные значения молярной доли индия по сравнению с ожидаемыми. На рис. 5 указаны величины молярной доли индия в квантовых ямах прямоугольной формы, при которых результаты расчета и экспериментальные данные совпадают. Определенные таким образом из зависимостей $E_{e1-hh1} = f(d, x)$ параметры квантовых ям приведены в табл. 2 (расчет 1).

Для нахождения причин различия теоретических и экспериментальных результатов был проведен расчет энергии люминесцентного перехода в квантовых ямах ступенчатой формы. Как уже упоминалось (табл. 1), анализ КДО показал, что нижняя приграничная область квантовых ям образцов A и B толщиной ~ 3 нм имеет меньшее содержание атомов индия, чем остальной объем слоя (рис. 2, a). Образование такой области обеднения обусловлено поверхностной сегрегацией атомов индия в процессе роста квантовой ямы. Используемые нами повышенные температуры роста, необходимые для получения высокой проводимости In-содержащих каналов, способствуют реализации данного эффекта. Образующийся вследствие этого избыток индия в приповерхностной области квантовой ямы либо десорбируется в

процессе прерывания роста на верхней границе, либо диффундирует в прилегающий слой GaAs. Последний механизм распределения атомов In был зарегистрирован при расчете КДО образца A (табл. 1). В этом случае обедненный слой формируется диффузией атомов In в близлежащую область GaAs-барьера толщиной 3 моно-слоя, предназначенную для предотвращения испарения индия при прерывании роста. Десорбция избытка индия имеет место для образца B , не покрытого защитной пленкой GaAs при прерывании роста на верхней гетерогранице.

С учетом сказанного выше были рассчитаны энергетические положения пиков ФЛ квантовых ям, состоящих из нескольких областей с различным содержанием индия. В случае образцов A и B параметры квантовых ям брались из табл. 1 (колонка КДО). При расчете энергий люминесцентных переходов квантовых ям образца C предполагалось, что слои InGaAs состоят из двух областей: области, обедненной индием из-за поверхностной сегрегации, и ядра ямы, состав которого близок к ожидаемому из режимов эпитаксии. Предполагалось также, что молярные доли индия в указанных слоях различаются в 1.5 раза. Совпадение рассчитанных энергий переходов $e1-hh1$ с экспериментальными значениями для выращенных квантовых ям с учетом усредненной энергии связи экситона, равной 7 мэВ, наблюдалось при параметрах, указанных в табл. 2.

Необходимо отметить хорошее совпадение результатов моделирования параметров выращенных квантовых ям образцов A и B с данными, полученными из рентгенодифракционных исследований. Из представленных данных следует необходимость учета неоднородного профиля состава квантовых ям. Это особенно актуально для узких (менее 6 нм) квантовых ям и повышенных температур эпитаксии, так как при этом толщина обедненной индием области сопоставима с толщиной ядра квантовой ямы.

Заключение

Проведенные в данной работе комплексные рентгенодифракционные и фотолюминесцентные исследования гетероструктур $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ позволили установить связь энергетического положения линий фотолюминесценции квантовых ям с неоднородностью их состава. Использование эмпирической формулы для определения ширины запрещенной зоны $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ в присутствии напряжений с привлечением модели квантовой ямы прямоугольной формы дает удовлетворительное согласие с экспериментом для относительно широких (более 6 нм) квантовых ям с низкой (менее 0.17) молярной долей индия. Корректировка модели за счет использования ступенчатого профиля состава квантовых ям, обнаруженного при рентгенодифракционных исследованиях, уменьшает расхождение между рассчитанными и экспериментальными результатами как для широких, так и для узких квантовых ям. При использованных режимах

эпитаксии неоднородность состава квантовых ям по толщине вблизи нижней границы обусловлена эффектами поверхностной сегрегации, а вблизи верхней границы — диффузией индия в прилегающий слой GaAs. Дальнейшее уточнение модели расчета спектров ФЛ узких квантовых ям требует точного знания отношения скачка потенциала в зоне проводимости к ширине запрещенной зоны $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($\Delta E_c / \Delta E_g$).

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 98-02-1758) и МНТЦ России "Физика твердотельных наноструктур" (проекты № 97-2019 и № 98-3009).

Список литературы

- [1] M.H. Herman, D. Bimberg, J. Christen. *J. Appl. Phys.*, **70**, R1 (1991).
- [2] H. Jurgens, T.P.E. Broekaert, C.C. Fonstad. *J. Appl. Phys.*, **71**, 2475 (1992).
- [3] N.N. Ledentsov, V.A. Shchukin, M. Grundmann, N. Kir-staedter, J. Bohrer, O.G. Schmidt, D. Bimberg, S.V. Zaitsev, V.M. Ustinov, A.E. Zhukov, P.S. Kop'ev, Zh.I. Alferov, O.A. Kosogov, S.S. Ruvimov, P. Werner, U. Gosele, J. Heydenreich. *Phys. Rev. B*, **54**, 8743 (1996).
- [4] F. Diette, D. Langrez, J.L. Codron, P. Delos, D. Theron, G. Salmer. *Electron. Lett.*, **32**, 848 (1996).
- [5] Y. Shiraishi, N. Furuhashi, A. Okamoto. *J. Appl. Phys.*, **76**, 5099 (1994).
- [6] С.В. Евстигнеев, Ю.В. Копаев, Ю.Г. Садофьев, Д.С. Шипицын, С.С. Шмелев. *Микроэлектроника*, **27**, 317 (1998).
- [7] S. Kuroda, N. Harada, T. Katakami, T. Mimura, M. Abe. *IEEE Trans. Electron. Dev.*, **ED-36**, 2196 (1989).
- [8] M. Wojtowicz, D. Pascua, A.-C. Han, T.R. Block, D.C. Streit. *J. Cryst. Growth*, **175–176**, 930 (1997).
- [9] T.G. Andersson, Z.G. Chen, V.D. Kulakovskii, A. Uddin, J.T. Vallin. *Phys. Rev. B*, **37** (8), 4032 (1988).
- [10] А.М. Афанасьев, М.А. Чуев, Р.М. Имамов, А.А. Ломов, В.Г. Мокеров, Ю.В. Федоров, А.В. Тук. *Кристаллография*, **42** (3), 514 (1997).
- [11] А.М. Афанасьев, М.А. Чуев, Р.М. Имамов, А.А. Ломов. *Кристаллография*, **45** (3) (2000).
- [12] E. Kuphal, A. Pocker, A. Eisenbach. *J. Appl. Phys.*, **73**, 4599 (1993).
- [13] K.H. Goetz, D. Bimberg, H. Jurgensen, J. Solders, A.V. Solomonov, G.F. Glinski, M. Razeghi. *J. Appl. Phys.*, **54**, 4543 (1983).
- [14] T.Y. Wang, G.B. Stringfellow. *J. Appl. Phys.*, **67** (1), 344 (1990).
- [15] I.V. Bradley, W.P. Gillin, K.P. Homewood, R.P. Webb. *J. Appl. Phys.*, **73**, 1686 (1993).
- [16] M.J.L.S. Haines, N. Ahmed, S.J.A. Adams, K. Mitchell, I.R. Agool, C.R. Pidgeon, B.C. Cavenett, E.P. O'Reilly, A. Ghiti, M.T. Emeny. *Phys. Rev. B*, **43**, 11 944 (1991).
- [17] K.J. Moore, G. Duggan, K. Woodbridge, C. Roberts. *Phys. Rev. B*, **41**, 1090 (1990).

Редактор Л.В. Шаронова

Investigation of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum wells by means of the low temperature photoluminescence and X-ray diffractometry

S.V. Evstigneev, R.M. Imamov⁺, A.A. Lomov⁺, Yu.G. Sadofyev, Yu.V. Khabarov*, M.A. Chuev⁼, D.S. Shipitsin

P.N. Lebedev Physical Institute,
Russian Academy of Sciences,
117924 Moscow, Russia

⁺ Institute of Crystallography,
Russian Academy of Sciences,
117333 Moscow, Russia

* Institute of Radioengineering and
Electronics, Russian Academy of Sciences,
103907 Moscow, Russia

⁼ Institute of Physics and Technology,
Russian Academy of Sciences,
117218 Moscow, Russia

Abstract Structures with InGaAs/GaAs quantum wells (QWs) were grown by MBE and investigated by means of the X-ray diffractometry and low temperature photoluminescence. Inhomogeneity of QWs composition throughout the thickness was found. Calculation of energy positions of luminescence lines for step-like QWs are in good agreement with the experiment.