

Влияние технологических параметров роста на характеристики двойных туннельно-связанных ям InGaAs/GaAs

© С.В. Хазанова*[¶], В.Е. Дегтярев*, Н.В. Малехонова*, Д.А. Павлов*, Н.В. Байдусь⁺

* Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 603950 Нижний Новгород, Россия

⁺ Научно-исследовательский физико-технический институт Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского, 603950 Нижний Новгород, Россия

(Получена 23 мая 2014 г. Принята к печати 15 июня 2014 г.)

Проведен комплексный анализ гетероструктур с двойными туннельно-связанными квантовыми ямами InGaAs/GaAs. Методами высокоразрешающей просвечивающей электронной микроскопии и энергодисперсионной спектроскопии получены реальные профили состава исследуемых структур. Проведено сравнение с профилем, полученным с помощью компьютерного моделирования. Путем совместного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона рассчитаны энергетические состояния в квантово-размерной гетероструктуре исходного и реального профилей состава. Проведен подробный анализ влияния таких факторов, как ширина ям и барьера, степень фонового легирования. Таким образом, изучены оптические характеристики данных структур, влияние на них технологии роста и геометрии структуры. Данный подход позволяет уточнить истинную геометрию ям и барьеров, а также скорректировать параметры структуры и технологии роста для улучшения оптических характеристик.

1. Введение

Актуальность исследований периодических гетероструктур InGaAs/GaAs обусловлена их широким применением в современной оптоэлектронике в качестве источников излучения в различных областях ИК диапазона. Также асимметричные туннельно-связанные квантовые ямы используются в качестве рабочей области в квантовых каскадных лазерах [1], при создании быстродействующих оптических модуляторов в инфракрасном диапазоне. Принцип действия подобных излучающих структур с квантовыми ямами основан как на межзонных, так и на межподзонных переходах [2]. Энергии данных переходов составляют 12–20 мэВ, что представляет интерес при создании излучающих структур в терагерцовом диапазоне. Известно, что, варьируя параметры роста и геометрию гетероструктуры, можно оказывать существенное влияние как на вероятность межподзонных переходов, так и на энергетические и транспортные характеристики системы в целом [3].

Известно, что гетероструктуры с туннельно-связанными квантовыми ямами используются для исследований пространственного переноса между областями с высокой и низкой подвижностью [4]. Различие в подвижностях может быть вызвано дополнительным рассеянием в более узкой яме, также за счет шероховатости границ. Отсюда вытекает необходимость подробного структурного и теоретического изучения данных структур. Проведены исследования элементного состава сверхрешеток с целью выявления реального потенциала зонной диаграммы для системы двух туннельно-связанных ям. Теоретически с помощью совместного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона рассчитаны энергии меж-

подзонных переходов, огибающие волновых функций, матричные элементы оператора координаты для всех возможных переходов. Пользуясь данной методикой, проведен анализ влияния различных технологических параметров на характеристики выращиваемых структур.

2. Образцы и методика измерений

Гетероструктуры с туннельно-связанными квантовыми ямами выращены методом МОС-гидридной эпитаксии при атмосферном давлении и температуре подложки 600°C на полуизолирующих подложках (001) арсенида галлия. Источниками элементов являлись арсин, фосфин, триметилгаллий и триметилиндий. В данной работе исследуется гетероструктура, состоящая из 20 периодов двойных туннельно-связанных квантовых ям $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Каждый период состоит из узкой КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (толщиной 10 нм) и широкой ямы $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (18 нм), разделенных барьером GaAs шириной 6 нм. Кроме того, в структуре выращен слой GaAsP 5 нм, предназначенный для снятия упругих напряжений в кристаллической решетке. Содержание индия в слоях составляло 10% ($x = 0.1$).

Структурные исследования сверхрешетки проводились на высокоразрешающем просвечивающем электронном микроскопе JEM-2100F (JEOL, Япония) при ускоряющем напряжении 200 кВ. В результате исследований были получены снимки поперечного среза в атомном разрешении как в режиме микроскопа, так и в сканирующем режиме (рис. 1, а). Анализ (просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ)) снимков высокого разрешения методом геометрической фазы [5] в исследуемых структурах показал, что ориентация кристаллических плоскостей в сверхрешетках практически

[¶] E-mail: khazanova@phys.unn.ru

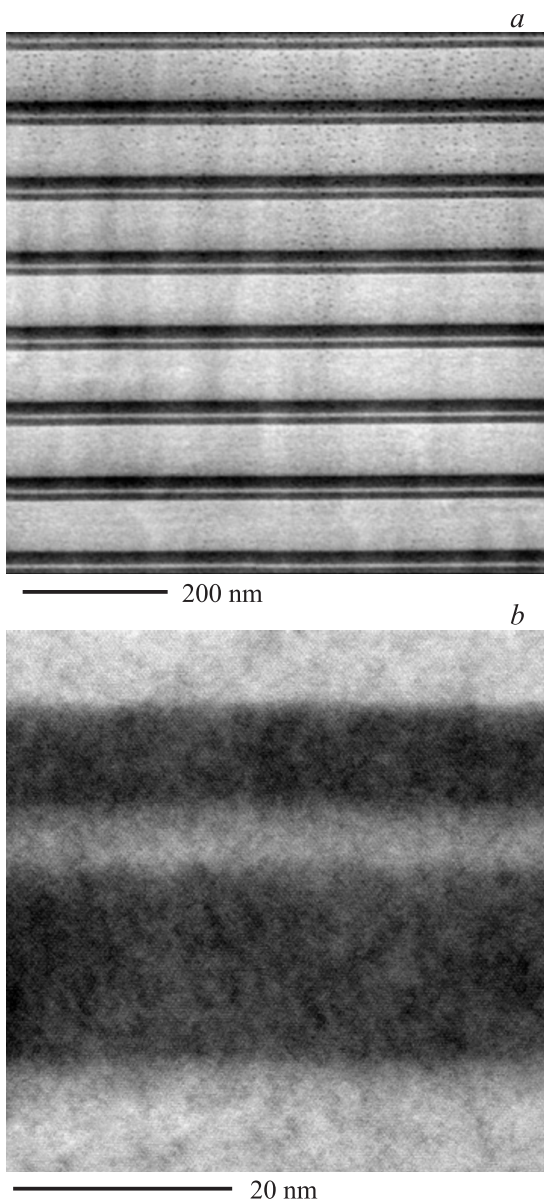


Рис. 1. *a* — обзорный ПЭМ снимок сверхрешетки InGaAs/GaAs; *b* — усредненный профиль содержания индия в одном периоде гетероструктуры, полученный из измерений ПЭМ.

одинакова. Также показано отсутствие заметных упругих деформаций в структуре. Исследование в сканирующем режиме, где наибольший вклад дает *Z*-контраст, позволяет хорошо различить слоистую структуру образца. Формирование *Z*-контраста связано с различной степенью рассеяния прошедших электронов в зависимости от атомной массы элементов, сконцентрированных в области сканирования [6]. В местах скопления более тяжелых элементов, таких как In, в матрице GaAs наблюдается более сильное рассеяние электронов, что на изображениях проявляется как более темный контраст (рис. 1, *b*).

Количественный анализ элементного состава структуры осуществлялся методом электронно-зондовой энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии. С этой целью применяется энергодисперсионный спектрометр (ЭДС) INCA EnergyTEM 250. При оценке точности подобных измерений необходимо учитывать наличие дрейфа сканирующего пучка. Поскольку на изображение профиля, получаемого данным методом, накладывается функция формы электронного пучка, диаметр которого при проведении эксперимента составлял 0.7 нм, методика ЭДС не дает точной картины профиля состава, но позволяет количественно определить атомный процент содержания примеси в слоях твердого раствора. Таким образом, можно сделать вывод, что только данные, полученные совместно с помощью построения *XZ*-контраста изображения и масштабированные с помощью ЭДС-анализа, представляют реальный профиль распределения In в одном периоде сверхрешетки (рис. 2, *a*).

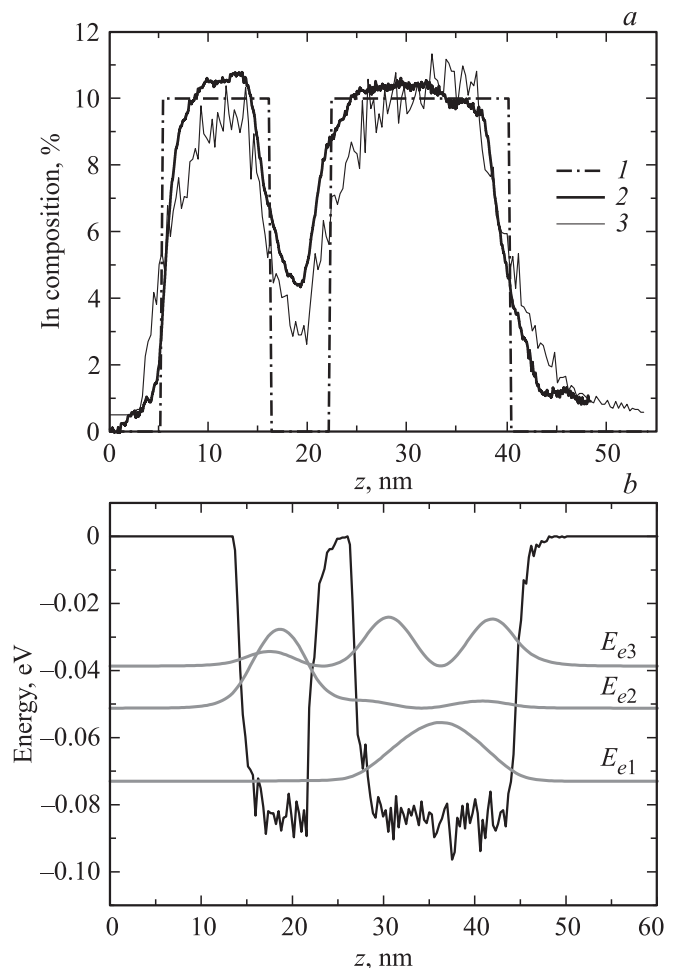


Рис. 2. *a*) 1 — распределение триметилдия в газовом потоке (прямоугольный профиль состава); 2 — профиль распределения In одного периода сверхрешетки, построенный с помощью *Z*-контраста изображения и масштабированный по данным ЭДС; 3 — профиль распределения In, полученный моделированием. *b*) рассчитанный энергетический спектр и огибающие волновых функций.

3. Численные расчеты

Положение уровней квантования и форма огибающих волновых функций и в системе двух связанных ям существенно зависят от взаимного расположения ям, их ширины и толщины барьера. Отсюда вытекает необходимость детального теоретического анализа влияния геометрических параметров структуры на вероятность возможных оптических переходов как межзонных, так и межподзонных.

Энергетический спектр и огибающие волновых функций получены с помощью самосогласованной процедуры решения уравнений Шрёдингера и Пуассона в рамках приближения эффективной массы. Для решения данных уравнений использовался численный подход на основе метода конечных разностей [7]. Были вычислены профили состава, положения уровней размерного квантования, квадраты огибающих волновых функций, матричные элементы оператора координаты для состояний электронов в зоне проводимости. Согласно расчетам, в исследуемой структуре хорошо различимы три энергетических уровня, соответствующих квантово-размерным подзонам: E_{e1} — уровень локализован в широкой КЯ, E_{e2} — уровень обобщенный, но более локализован в широкой КЯ, E_{e3} — уровень обобщенный, но более локализован в узкой КЯ (см. рис. 2, *b*).

Для изучения влияния технологических параметров был проведен анализ поведения матричных элементов оператора координаты $x_{i,j} \sim \langle \Psi_i | x | \Psi_j \rangle$ и положений уровней размерного квантования в зависимости от ширины ям, барьера, температуры роста. Также теоретически было изучено влияние степени объемного легирования на энергетические и оптические свойства структуры.

Структурные исследования показывают, что реальный профиль состава заметно отличается от ожидаемого исходного профиля, заданного в процессе роста (рис. 2, *a*). Известно, что размытие гетерограниц для данных материалов, в основном вызвано эффектом сегрегации индия в процессе эпитаксиального роста [8]. Для моделирования сегрегации индия использовалась модель [9] эпитаксиального роста структуры Монте-Карло.

4. Результаты и обсуждение

„Электронный“ и „дырочный“ спектры в квантовой структуре весьма чувствительны к распределениям состава и упругих деформаций. На рис. 2, *a* изображены различные профили состава: исходный прямоугольный, полученный из структурных исследований, с помощью моделирования с учетом эффекта сегрегации. Очевидно, что профиль реального состава структуры имеет форму, отличную от прямоугольной, что приводит к заметным изменениям вида потенциала зоны проводимости. Изменение формы ям и барьера вследствие сегрегации состава может приводить к изменению как оптических,

так и транспортных характеристик структуры. Потенциальный профиль зоны проводимости, полученный моделированием Монте-Карло с учетом сегрегации состава, хорошо согласуется с профилем, полученным с помощью структурных исследований (рис. 2, *b*). Ранее было показано [10], что эффект сегрегации приводит к сдвигу (до 5 мэВ) всех уровней размерного квантования, но незначительно влияет на вероятность энергии межподзонных переходов. Однако с увеличением температуры роста размытие границ возрастает, также растут флуктуации состава в каждом из слоев, что может привести к резкому изменению эффективной высоты барьера и характеру переноса электронов между ямами.

Компьютерное моделирование роста подобных структур совместно с теоретическими расчетами позволяет скорректировать ширину ям и барьеров с целью оптимизации технологических параметров (в частности, таких как температура роста) при выращивании образцов. Также оно позволяет провести анализ экспериментальных данных с учетом реальных неоднородностей состава и структуры гетерограниц.

В данной работе исследовано влияние геометрии структуры на локализацию волновых функций и вероятность межподзонных оптических переходов внутри зоны проводимости. Результаты исследований показывают, что наблюдается немонотонная зависимость вероятности оптических переходов как от ширины более узкой ямы (рис. 3), так и от ширины барьера между ямами (рис. 4). Таким образом, варьируя ширину ям и барьера в пределах от 6 до 12 нм, можно добиться заметного изменения вероятности исследуемых переходов. Можно сделать вывод, что для каждого состава существует область оптимального соотношения ширины узкой ямы и барьера, в которой наблюдается максимум вероятности межподзонного перехода между 2-м и 3-м уровнями в зоне проводимости. При этом более заметное влияние на положение максимума вероятности перехода оказывает

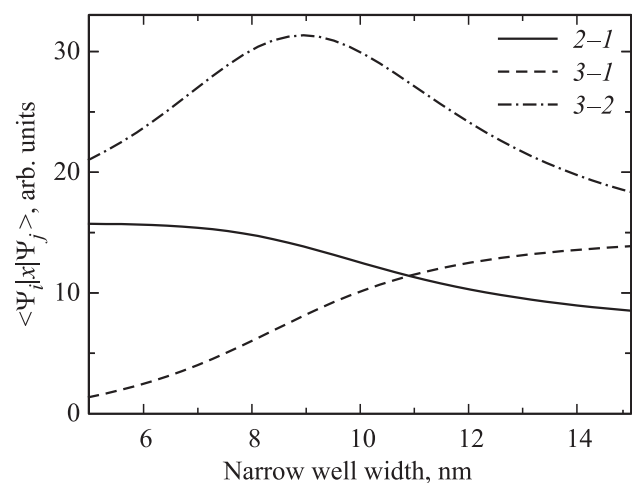


Рис. 3. Зависимость матричных элементов оператора координаты $\langle \Psi_i | x | \Psi_j \rangle$ для межподзонных ($E_{e3}-E_{e1}$, $E_{e2}-E_{e1}$, $E_{e3}-E_{e2}$) переходов в зоне проводимости от ширины узкой ямы.

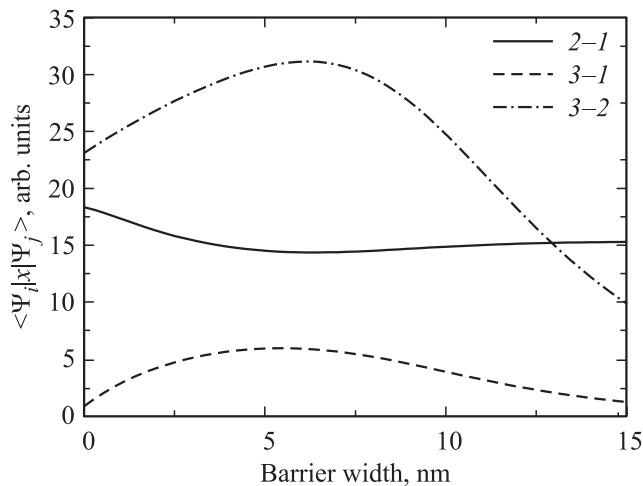


Рис. 4. Зависимость матричных элементов оператора координаты $\langle \Psi_i | x | \Psi_j \rangle$ для межподзонных переходов ($E_{e3} - E_{e1}$, $E_{e2} - E_{e1}$, $E_{e3} - E_{e2}$) в зоне проводимости от ширины барьера.

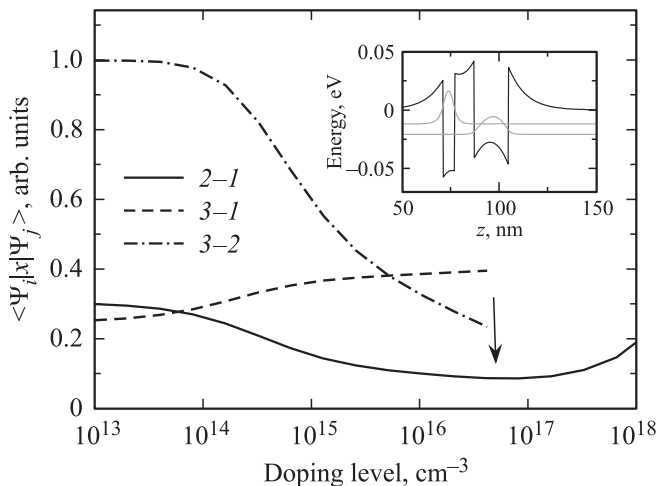


Рис. 5. Зависимость матричных элементов оператора координаты для межподзонных переходов в зоне проводимости от степени легирования. Стрелкой отмечен пороговый уровень легирования. На вставке — зонная диаграмма для уровня легирования $N_D = 7 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

ширина узкой ямы. Кроме того, можно отметить, что с уменьшением содержания индия наблюдается смещение области оптимальных параметров.

Результаты расчетов демонстрируют зависимость вероятности переходов от степени объемного легирования структуры. С изменением концентрации легирующей примеси меняется как энергия возможных энергетических переходов внутри системы связанных ям, так и вероятность этих переходов. Расчеты показывают, что начиная с определенного значения концентрации легирующей примеси вследствие сильного изгиба зоны в системе ям наблюдается уже не три, а только два уровня размерного квантования. На рис. 5 показано исчезновение двух энергетических переходов из-за вы-

тачивания верхнего уровня из квантовой ямы при пороговом значении легирования $N_D = 7 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

5. Заключение

Таким образом, проведен подробный комплексный анализ двойных туннельно-связанных квантовых ям InGaAs/GaAs. Экспериментально получены профили состава методами просвечивающей электронной микроскопии. Численно осуществлены моделирование процесса роста данных структур и расчет энергетического спектра. Данная методика расчетов позволяет исследовать влияние ширины ям туннельных барьеров на положение энергетических уровней в квантово-размерной гетероструктуре, а следовательно, на энергию межзонных и межподзонных оптических переходов. В частности, было выявлено оптимальное соотношение геометрических параметров при заданном содержании индия. Получено пороговое значение объемного легирования структуры. С помощью проведенных исследований можно скорректировать параметры роста для улучшения требуемых свойств гетероструктур. Подобные исследования и расчеты могут служить методом диагностики и прогнозирования качества гетерограниц в структурах, выращиваемых для оптоэлектронных приборов.

Работа поддержана грантом (соглашение от 27 августа 2013 г. № 02.В.49.21.0003 между МОН РФ и ННГУ).

Список литературы

- [1] J. Faist, F. Capasso, D.L. Sivco, A.L. Hutchingson, A.Y. Cho. *Science*, **264**, 553 (1994).
- [2] В.Л. Зерова, В.В. Капасв, Л.Е. Воробьев, Д.А. Фирсов, S. Schmidt, E.A. Зибик, A. Seilmeier, E. Towe. *ФТП*, **38** (12), 1455 (2004)
- [3] Н.В. Байдусь, П.А. Белевский, А.А. Бирюков, В.В. Вайнберг, М.Н. Винославский, А.В. Иконников, Б.Н. Звонков, А.С. Пилипчук, В.Н. Порошин. *ФТП*, **44** (11), 1543 (2010).
- [4] Z.S. Gribnikov, K. Hess, G.A. Kosinovsky. *J. Appl. Phys.*, **77** (4), 1337 (1995).
- [5] M. Hÿtch, C. Gatel, F. Houdellier, E. Snoeck, K. Ishizuka. *Microscopy and Analysis*, **26** (7), 6 (2012).
- [6] S.J. Pennycook, B. Rafferty, P.D. Nellist. *Microsc. Microanal.*, **6**, 343 (2000).
- [7] П.Н. Брунков, А.А. Гуткин и др. *ФТП*, **45** (6), 829 (2011).
- [8] M. Schowalter, A. Rosenauer, D. Gerthsen. *Appl. Phys. Lett.*, **88**, 111 906 (2006).
- [9] S.V. Khazanova, M.I. Vasilevskiy. *Semicond. Sci. Technol.*, **25**, 085 008 (2010).
- [10] С.В. Хазанова, Н.В. Байдусь, Б.Н. Звонков, Н.В. Малехонова, Д.А. Павлов, А.И. Бобров, В.Е. Дегтярев, Д.С. Смотрин. *ФТП*, **46** (12), 1510 (2012).

Редактор Т.А. Полянская

The effect of technology growth on the optical characteristics of InGaAs/GaAs double tunnel-coupled quantum wells

*S.V. Khazanova**, *V.E. Degtyarev**,
*N.V. Malekhonova**, *D.A. Pavlov**, *N.V. Baidus'+*

* N.I. Lobachevsky State University,
603950 Nizhny Novgorod, Russia

+ Physicotechnical Research Institute
of Lobachevsky Nizhny Novgorod State University,
603950 Nizhny Novgorod, Russia

Abstract In this work we investigate the double tunnel-coupled quantum well heterostructures InGaAs/GaAs both experimentally and theoretically. Distribution of InGaAs alloy composition was obtained by means transmission electron microscopy method and X-ray energy dispersive spectrometry. Numerical simulation of growth process was carried out. Self-consistent solution of Schrödinger and Poisson equations is used for calculation of the quantum energy spectrum of the structure. Detailed analysis of quantum wells and barriers geometry is performed. Also doping effect on the energy spectrum is investigated. Thus, we demonstrate complex method for optimization of growth parameters and for quality control of the structures.