

Деформация слоев в сверхрешетках AlGaIn/GaN по данным рентгенодифракционного анализа

© Р.Н. Кютт, М.П. Щеглов, В.Ю. Давыдов, А.С. Усиков

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

(Поступила в Редакцию 23 июня 2003 г.)

Методом трехкристальной рентгеновской дифрактометрии проведены структурные исследования нитридных сверхрешеток AlGaIn/GaN, выращенных методом MOCVD на сапфире с буферным слоем GaN и AlGaIn, для которых в широком интервале варьировались: период CP (от 50 до 3500 Å), содержание Al в слоях $Al_xGa_{1-x}N$ ($0.1 \leq x \leq 0.5$) и состав буферного слоя. Характерные для CP пики-сателлиты вплоть до третьего порядка хорошо выявляются на $\theta-2\theta$ -кривых симметричных брэгговских отражений, θ -кривых симметричной Лауэ-геометрии. Соответствующие кривые хорошо моделируются на основе кинематических формул. С использованием комбинации симметричных брэгговского и лауэвского отражений определены как средние параметры CP, так и толщина, состав и деформация отдельных слоев. Показано, что все исследованные образцы являются частично релаксированными структурами с релаксацией упругих напряжений как между CP в целом и буферным слоем, так и между отдельными слоями. Слои AlGaIn находятся в состоянии растяжения, а слои GaN — в состоянии сжатия, при этом по абсолютной величине сжатие слоев GaN больше, чем растяжение слоев AlGaIn, что обусловлено вкладом термоупругих напряжений.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (гранты № 03-02-16164 и 03-02-17562), Президиумом РАН (комплексная программа научных исследований „Низкоразмерные квантовые структуры“) и МО РФ (грант № E02-3.4-182).

Нитриды галлия, алюминия и твердые растворы на их основе являются перспективными материалами для оптоэлектронных устройств, работающих в голубой и фиолетовой областях спектра. Среди них пристальное внимание исследователей привлекает твердый раствор AlGaIn вследствие применения не только в лазерных структурах, где он используется в качестве „cladding“ слоев, но и в полевых транзисторах, работающих под большим напряжением и при высоких температурах. Вследствие большого пьезоэлектрического коэффициента и механических напряжений, возникающих между слоями GaN и AlGaIn, в гетероструктурах AlGaIn/GaN могут генерироваться сильные электрические поля, способствующие образованию на гетерограницах между слоями большой концентрации двумерного электронного газа.

Начиная с работы Накамуры и др. [1], объектом широкого круга оптических и электрических исследований стали сверхрешетки (CP) AlN/GaN и AlGaIn/GaN [2–5]. Физические свойства этих структур сильно зависят от напряжений в слоях CP и от дефектов, образующихся при их релаксации. Поэтому большое значение приобретают исследования деформационного состояния слоев CP, процессов их релаксации и образующихся при этом дефектов.

Рентгеновская дифрактометрия является оптимальным инструментом определения структурных параметров CP. Она используется и при исследовании нитридных структур [6–17]. В большинстве этих работ внимание сосредоточено на определении пределов когерентного роста CP AlGaIn/GaN при разных значениях концентрации Al, периода и общей толщины структуры [6,7,10–12]. Исходя из этого информация, получаемая

из рентгенодифракционного анализа, ограничивалась определением композиции слоев и общего уровня релаксации CP относительно буфера. Наиболее подробно процессы и механизм релаксации упругих напряжений в CP AlGaIn/GaN рассмотрены в [13] с использованием оптической микроскопии, рентгенодифракционного анализа и фотолюминесцентной спектроскопии. В [15] показано, что рост CP AlGaIn/AlN в качестве буфера позволяет значительно уменьшить плотность прорастающих дислокаций. В [16] исследована дефектная структура системы AlGaIn/GaN на GaN-буфере и показано ее влияние на транспортные свойства.

В настоящей работе проведено детальное рентгенодифракционное исследование сверхрешеток AlGaIn/GaN в широком диапазоне изменения толщины слоев, концентрации Al и состава буферного слоя. Поскольку как одиночные эпитаксиальные слои GaN, так и многослойные системы на его основе относятся к сильнонарушенным структурам с большой плотностью дефектов [17–19], особое внимание уделено проблемам определения параметров сверхрешеток с использованием комбинаций рентгенодифракционных отражений.

1. Дифракция от сверхрешеток и определение структурных параметров

Дифракционные кривые от CP содержат периодически расположенные пики-сателлиты, обусловленные периодическим изменением по глубине CP деформации $\varepsilon(z)$ и рассеивающей способности (структурного фактора) $F(z)$. При этом взаимная интенсивность сателлитов

зависит от характера распределения этих величин по глубине одного периода. Для симметричных отражений деформация $\varepsilon(z)$ выражается через изменение межплоскостного расстояния измеряемого рефлекса $d(z)$ (для несимметричных отражений она включает в себя еще и взаимные развороты отражающих плоскостей, возникающие в когерентно сопряженных или не полностью релаксированных слоях СР). В большинстве случаев эпитаксиальные СР могут быть представлены состоящими из двух чередующихся слоев разного состава с резкой границей между ними. Тогда распределения d и F по периоду характеризуются двумя значениями межплоскостного расстояния d_1 и d_2 , структурными факторами F_1 и F_2 и толщиной этих слоев t_1 и t_2 . Для слоев тройных твердых растворов структурные факторы непосредственно определяются их составом x_1 и x_2 ; что касается межплоскостного расстояния, то его значения зависят не только от состава, но и от деформационного состояния этих слоев, которое может быть в свою очередь описано параметрами релаксации. Таким образом, имеется шесть независимых структурных параметров, которые определяют вид дифракционной картины и которые нужно получить из дифракционного анализа (x_1, x_2, t_1, t_2 и два параметра релаксации). Для системы GaN/Al_xGa_{1-x}N, где один слой представляет собой чистое вещество, а другой — твердый раствор, число независимых параметров уменьшается до пяти.

В пленках со структурой вюртцита, растущих вдоль гексагональной оси (0001), параметр решетки a определяет межплоскостные расстояния в плоскости интерфейса, параметр c — перпендикулярно ему. Обозначим через a_i и c_i реальные (измеряемые) параметры решетки i -го слоя в системе, а через a_i^b и c_i^b — соответствующие значения для слоя данного состава в свободном (ненапряженном состоянии), где индекс $i = 0$ соответствует буферному слою, а $i = 1, 2$ — первому и второму субслоям СР. Упругая деформация слоев СР равна

$$\varepsilon_i = \frac{a_i - a_i^b}{a_i^b}, \quad (1)$$

а реальный параметр $c_i = c_i^b(1 - p\varepsilon_i)$, где $p = 2c_{13}/c_{33}$ есть отношение Пуассона. Тогда релаксацию упругих напряжений в СР можно характеризовать скачком $\Delta a_i = a_i - a_{i-1}$ параметра решетки a на гетерогранице или относительным уровнем релаксации

$$r_i = \frac{a_i - a_{i-1}}{a_i^b - a_{i-1}^b} = \frac{\Delta a_i}{a_i^b - a_{i-1}^b}. \quad (2)$$

Величины Δa_1 и r_1 соответствуют релаксации на нижней гетерогранице (между буферным слоем и первым слоем СР), а Δa_2 и r_2 — релаксации на границах между отдельными слоями (рис. 1). Для нерелаксированной когерентной структуры $\Delta a_1 = \Delta a_2 = 0$. При сохранении когерентности отдельных слоев СР и ее релаксации как целого относительно буфера $\Delta a_2 = 0$, Δa_1 может быть как меньше, так и больше нуля в зависимости от состава буферного слоя. В общем случае релаксированной

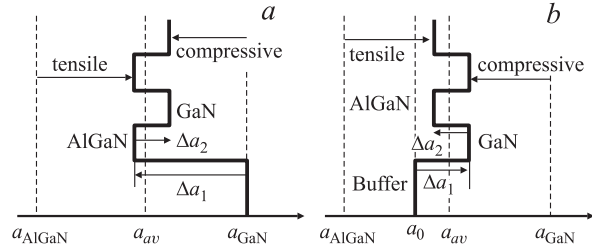


Рис. 1. Схематическое представление изменения параметра a по глубине релаксированной некогерентной сверхрешетки AlGaIn/GaN на буферном слое GaN (a) и AlGaIn (b). В последнем случае содержание Al в буферном слое больше, чем в среднем по сверхрешетке. Штриховые линии — параметры решетки GaN, AlGaIn в ненапряженном состоянии, а также среднее значение a по СР. Δa_1 и Δa_2 — скачки параметра на гетерогранице между буфером и СР, а также между слоями СР соответственно.

некогерентной СР оба скачка параметра будут отличны от нуля, при этом для сохранения периодичности структуры Δa_2 должно быть одинаковым по абсолютной величине на всех границах между слоями СР.

Из дифракционной кривой симметричного брэгговского отражения непосредственно определяются: период T — из расстояния $\delta\theta$ между спутниками и средний параметр $\langle c \rangle$ — из углового положения среднего пика (нулевого спутника) СР на шкале углов 2θ . Из анализа формул кинематической теории рассеяния, записанных для двухслойной СР с резкими интерфейсами [20], следует, что отношение интенсивности спутников n -го порядка к интенсивности нулевого I_n/I_0 может быть записано в виде простых аналитических выражений и является функцией трех величин: отношения толщин двух слоев t_2/t_1 , отношения их структурных факторов F_2/F_1 и деформационного параметра, который для симметричного брэгговского отражения может быть представлен в виде

$$B = \frac{2\pi \cdot \sin(\theta)}{\lambda} \cdot \Delta\varepsilon_{\perp} \cdot \frac{t_1 \cdot t_2}{t_1 + t_2}. \quad (3)$$

С учетом релаксации между слоями разность $\Delta\varepsilon_{\perp}$ деформаций двух слоев СР равна

$$\Delta\varepsilon_{\perp} = \frac{c_{\text{AlIn}} - c_{\text{GaN}}}{c_{\text{GaN}}} \cdot x + p \cdot \frac{a_{\text{AlIn}} - a_{\text{GaN}}}{a_{\text{GaN}}} \cdot x - p \cdot \frac{\Delta a_2}{a_{\text{GaN}}}, \quad (4)$$

где c_{GaN} , a_{GaN} и c_{AlIn} , a_{AlIn} — табличные параметры решетки соединений GaN и AlIn соответственно, а отношение Пуассона $p = 2c_{13}/c_{33}$ взято одинаковым для слоев GaN и AlGaIn. При прочих равных условиях чем больше значение B , тем выше интенсивности боковых спутников по отношению к нулевому, при $B > 1.5$ нулевой спутник может стать меньше остальных пиков, и встает проблема его идентификации. Три указанные величины ($B, t_2/t_1, F_2/F_1$) могут быть вычислены из относительной интенсивности спутников, если их число на экспериментальной кривой больше трех.

Несмотря на то что таким путем все пять независимых параметров СР могут быть получены из анализа одной кривой симметричного брэгговского отражения, точность их определения не очень велика, особенно при малых концентрациях Al в слое твердого раствора. Поэтому в настоящей работе в качестве дополнительного параметра использовалось 2θ -угловое положение среднего пика СР на кривой симметричного Лауэ-отражения, из которого непосредственно вычисляется значение среднего параметра a сверхрешетки

$$\langle a \rangle = (a_1 t_1 + a_2 t_2) / T. \quad (5)$$

Из величин B , t_2/t_1 , $\langle c \rangle$ и $\langle a \rangle$ определялись реальные параметры c и a для обоих слоев СР, а отсюда содержание Al в слое AlGaN и параметры релаксации Δa_1 и Δa_2 . Описанный выше аналитический подход содержит ряд приближений (отсутствие переходных слоев между GaN и AlGaN, постоянство структурных факторов в измеряемом угловом интервале). Поэтому полученные параметры использовались в качестве начальных при расчете дифракционных кривых, а затем их значения уточнялись путем сравнения расчетных кривых с экспериментальными. В настоящей работе расчет кривых отражения проводился на основе кинематического приближения [20], процедура расчета описана в работе [21].

Расчитанные кривые отражения характеризуют идеальную сверхрешетку без структурных дефектов. Для дефектных структур, к которым относится изучаемая система, пики-сателлиты уширены за счет влияния дефектов. Однако практика показала, что все сателлиты сверхрешетки искажаются одинаковым образом (если учитывать только влияние дефектов, а не ошибок в периодичности СР). Это обстоятельство позволяет проводить сравнение расчетных (для идеальной СР) и экспериментальных (искаженных) кривых отражения по относительной высоте сателлитов или по их интегральной интенсивности.

При определении характеристик СР были использованы следующие параметры: для GaN — $a = 3.189 \text{ \AA}$, $c = 5.1851 \text{ \AA}$, $p = 0.53$; для AlN — $a = 3.113 \text{ \AA}$, $c = 4.9816 \text{ \AA}$, $p = 0.49$ [22–23].

2. Эксперимент

Сверхрешетки AlGaN/GaN были выращены методом МOCVD на подложках 0001-сапфира с буферным слоем, толщина которого составляла около $1 \mu\text{m}$. Исследовались три серии образцов. Две серии образцов содержали СР с равными толщинами слоев, с концентрацией Al в одном из них около 26 at.%, период варьировался от 5 до 320 nm. В одной серии слои выращивались на буфере GaN, в другой — на AlGaN. В образцах третьей серии выдерживался неизменным период СР (около 10 nm), но менялась концентрация Al в слое от 10 до 50 at.%. Общая толщина СР была неизменной (около $3 \mu\text{m}$).

Рентгенодифракционные измерения проводились на трехкристальном дифрактометре с использованием $\text{CuK}\alpha$ -излучения. Измерялись дифракционные кривые θ -

и θ – 2θ -сканирования в двух геометриях дифракции для образцов: симметричном брэгговском (отражение 0002) и симметричном Лауэ (10–10). При измерении кривых θ – 2θ -моды фиксировалась абсолютная шкала углов рассеяния 2θ . Для некоторых образцов снималось полное распределение интенсивности вокруг узла обратной решетки. Отражения монохроматора и анализатора выбирались с учетом необходимости получения большей интенсивности результирующего сигнала и достижения наименьшей дисперсии в зависимости от измеряемого рефлекса образца.

3. Результаты и обсуждение

Двухкристальные интегральные кривые симметричных брэгговских отражений не выявляют какой-либо тонкой структуры, демонстрируя общий уширенный пик от всего слоя буфер-сверхрешетка. Однако такая структура четко видна на трехкристальных кривых θ – 2θ -сканирования (рис. 2). В зависимости от параметров СР на них наблюдаются сателлиты вплоть до пятого порядка, что является свидетельством хорошей периодичности выращенных структур. Кроме пиков СР на большинстве кривых можно зафиксировать также отражение от буферного слоя. Для некоторых образцов (с периодом СР 20–80 \AA) сателлиты фиксируются и в симметричной Лауэ-геометрии (на кривых θ -моды), хотя их интенсивность намного меньше интенсивности среднего пика отражения СР. Пример такой кривой приведен на рис. 3, а.

Такая выборочная выявляемость сателлитов на дифракционных кривых объясняется спецификой дислокационной структуры пленок GaN. Она состоит в основном из прямолинейных дислокаций винтового и краевого типов, перпендикулярных гетерогранице. Их влияние сводится к тому, что распределение интенсивности вокруг узлов обратной решетки растягивается в направлении, параллельном поверхности [24,25]. Уширение рефлексов вдоль нормали к поверхности намного меньше. Поскольку дополнительные центры отражения (сателлиты) также распределены вдоль нормали (в направлении периодического изменения состава кристаллического слоя), они могут быть зафиксированы на кривых, представляющих сечение узлов обратной решетки в этом направлении, т.е. для θ – 2θ -сканирования в симметричной брэгговской геометрии и для θ -кривых в симметричном случае Лауэ.

Из рис. 2 видно, что с увеличением периода (T) СР при сохранении x кривые 0002-отражения заметно меняют свою форму. Интенсивность среднего пика падает, а боковых сателлитов возрастает. При больших периодах ($T > 1600 \text{ \AA}$) кривая распадается на две системы осцилляций, локализованных около центров отражения двух слоев GaN и AlGaN. Такая трансформация связана с увеличением деформационного параметра B с увеличением периода СР. Что касается углового положения среднего пика, то оно практически одинаково для СР с периодом в интервале 50–400 \AA .

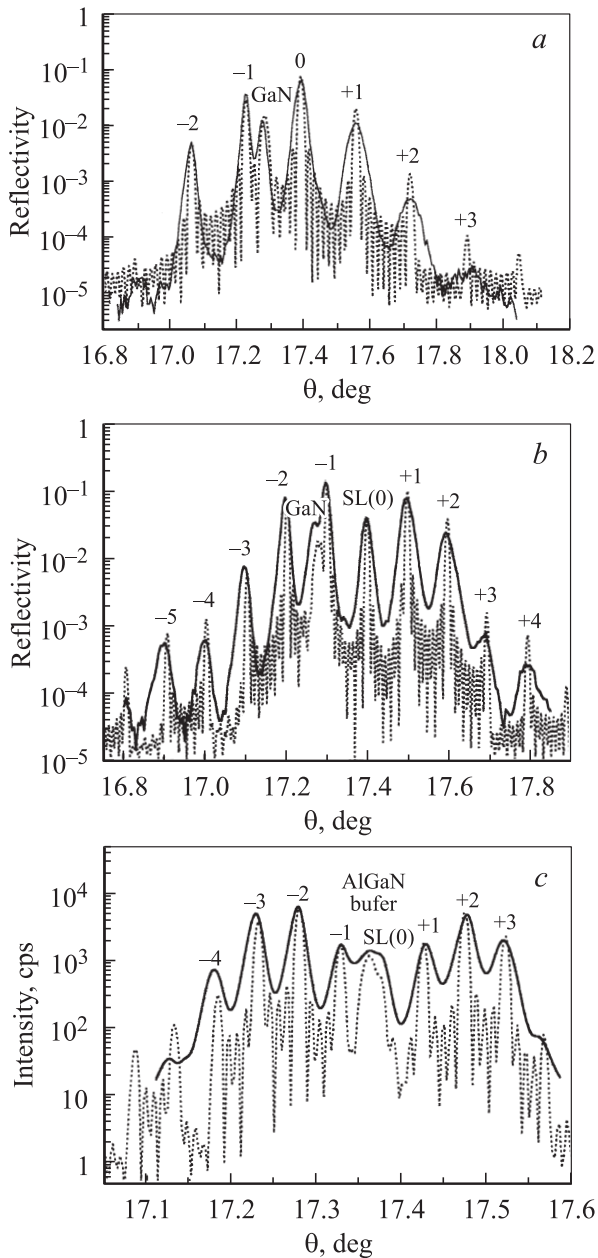


Рис. 2. Трехкристальные дифракционные кривые θ - 2θ -сканирования симметричного брэгговского отражения 0002 для образцов с разным периодом СР. Сплошная линия — эксперимент, штриховая — расчет, выполненный для СР с параметрами, приведенными в табл. 2 и 3. T , Å: a — 281, b — 470, c — 950.

Для СР с одинаковыми технологическими параметрами, но выращенных на разных буферных слоях — GaN и AlGaIn — дифракционные кривые мало отличаются друг от друга как по положению, так и по интенсивности спутников. Угловое положение среднего пика СР для симметричной Лауэ-дифракции, определяемое по углу анализатора в 2θ -моду сканирования, также мало меняется с увеличением периода и не зависит от состава буферного слоя (рис. 3, b).

С увеличением концентрации Al в слоях СР меняется как положение спутников (смещение в сторону меньших углов), так и относительная интенсивность спутников в сторону уменьшения нулевого и увеличения боковых спутников. Последнее вызвано ростом разности деформации двух слоев $\Delta\epsilon$ и, следовательно, параметра B .

Параметры, полученные непосредственно из дифракционных кривых (период и средние параметры $\langle a \rangle$ и $\langle c \rangle$ СР) представлены в табл. 1. Степень релаксации СР в целом может быть определена из отношения $\langle c \rangle / \langle a \rangle$. На рис. 4 значения этой величины нанесены в зависимости от периода СР для образцов серий 1 и 2 и от среднего содержания Al в СР для образцов третьей серии. Экспериментальные точки на рис. 4 лежат далеко от линий, характеризующих псевдоморфные напряженные структуры и немного выше зависимостей, рассчитанных для полной релаксации, что указывает на то, что СР в целом находятся в сжатом состоянии. Отсюда следует, что исследования СР являются релаксационными структурами, а сжатие вызвано напряжениями, возникающими из-за разности коэффициентов теплового расширения α подложки сапфира ($\alpha = 7.2 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$), с одной стороны, и слоев GaN и AlGaIn ($\alpha_{\text{GaN}} = 5.6 \cdot 10^{-6}$

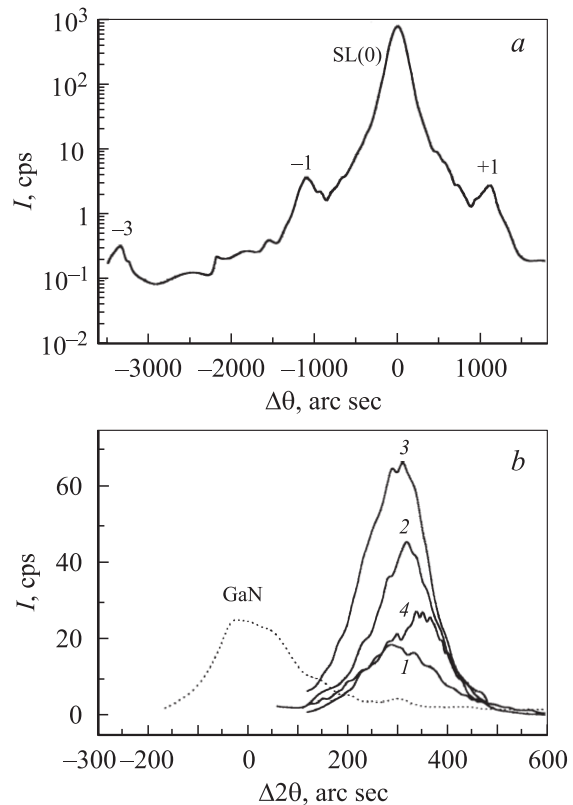


Рис. 3. Дифракционные кривые для симметричного Лауэ-отражения 1010. a — трехкристальная кривая θ -сканирования для образца 1044 (период 570 Å). b — центральные пики СР (сплошные линии) на кривых 2θ -сканирования для образцов 1059 (1), 1044 (2), 927 (3), 870 (4) и буферного слоя GaN (штрих).

Таблица 1. Средние параметры сверхрешеток, полученные из рентгенодифракционных кривых

Буферный слой	GaN				AlGaIn						
	1055	1054	1051	1044	1072	1059	927	870	1070	1074	1075
№ образца											
Период, Å	53.5	129	281	470	92	238	570	950	119	142	142
$\langle c \rangle$, Å	5.1543	5.1523	5.1526	5.1543	5.1492	5.1543	5.1621	5.1598	5.1703	5.1340	5.1224
$\langle a \rangle$, Å	3.1759	3.1761	3.1766	3.1748	3.1721	3.1755	3.1757	3.1752	3.1812	3.1664	3.1620

Таблица 2. Параметры слоев сверхрешеток AlGaIn/GaN с разными периодами (см. табл. 1), определенные из анализа дифракционных кривых

№ образца	1055	1054	1051	1044	1059	927	870
$t_{\text{AlGaIn}}/t_{\text{GaN}}$	1.25	1.05	1.15	1.05	1	1.1	1.1
x	0.286	0.31	0.30	0.31	0.30	0.25	0.25
$\epsilon_{\text{GaN}}, 10^{-3}$	-2.4	-4.0	-2.6	-4.4	-3.1	-3.6	-3.3
$\epsilon_{\text{AlGaIn}}, 10^{-3}$	1.3	3.5	2.2	2.9	2.3	1.4	1.1
Δa_1 , Å	-0.018	-0.012	-0.016	-0.014	0.008	0.001	0.003
Δa_2 , Å	0.010	0	0.008	0	-0.007	-0.003	-0.006

$\alpha_{\text{AlIn}} = 4.2 \cdot 10^{-6}$) — с другой. Из рис. 4, *a* видно, что точки, относящиеся к СР, выращенным на буфере GaN, лежат в целом ниже, чем значения $\langle c \rangle / \langle a \rangle$ для структур с буферным слоем AlGaIn. Данный результат может быть следствием того, что кроме вклада термоупругих напряжений в системе имеется остаточная деформация как результат неполного снятия напряжений несоответствия между буферным слоем и СР в целом при температуре релаксации. Эта деформация является в первом случае деформацией растяжения, а во втором — сжатия (если содержание Al в буферном слое больше, чем в среднем в СР). На рис. 4, *a* наблюдается также некоторое увеличение отношения $\langle c \rangle / \langle a \rangle$ с ростом периода. С увеличением содержания Al отношение $\langle c \rangle / \langle a \rangle$ уменьшается в полном соответствии с расчетной зависимостью для релаксированных СР (рис. 4, *b*).

Параметры отдельных слоев СР, определенные аналитически по методике, описанной выше и уточненные путем сравнения экспериментальных и расчетных кривых отражения, приведены в табл. 2 (для первых двух серий образцов) и 3 (для СР третьей серии). Кривые, рассчитанные с использованием этих параметров, показаны на рис. 2 штриховой линией. Расчет, выполненный по кинематической теории для идеальной сверхрешетки, позволяет достигнуть хорошего соответствия относительных интенсивностей спутников на расчетных и экспериментальных кривых, несмотря на то что общая толщина СР превышает экстинкционную длину.

Сравнивая полученные значения периода, толщины субслоев и состава слоя AlGaIn с параметрами, заложенными при росте, следует отметить их заметное расхождение. Период СР оказался в большинстве случаев больше предполагаемого примерно на 20%. Не имеет места также предполагаемое равенство толщин слоев AlGaIn и GaN (для большинства структур слой твердого

раствора оказался толще слоя GaN). Содержание Al в барьерном слое для образцов первых двух серий не равно заложенному значению $x = 0.26$, а колеблется от образца к образцу. Отметим, что это затрудняет анализ деформаций в исследованных СР, поскольку не позволяет пользоваться технологическими параметрами и заставляет определить все эти величины из дифракционных измерений.

Из табл. 2–3 видно, что слои GaN в СР находятся в состоянии сжатия ($\epsilon_{\text{GaN}} < 0$), а слои твердого раствора — в состоянии растяжения ($\epsilon_{\text{AlGaIn}} > 0$), причем это имеет место для всех исследованных структур независимо от состава буферного слоя (за исключением образца с наименьшей концентрацией Al). Из табл. 2 видно, что, хотя значения деформаций меняются от образца к образцу, какой-либо зависимости от периода СР не выявляется. Сжатие слоев GaN в среднем одинаково для структур, выращенных на буферном слое GaN и на буфере AlGaIn, но слои твердого раствора во втором случае испытывают меньшие деформации растяжения. Для серии структур, имеющих примерно одинаковый период, но разное содержание Al, деформации обоих составляющих слоев СР возрастают (по абсолютной величине) с увеличением концентрации Al.

Таблица 3. Параметры слоев сверхрешеток AlGaIn/GaN с разным содержанием Al в слое твердого раствора $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

№ образца	1070	1072	1074	1075
$t_{\text{AlGaIn}}/t_{\text{GaN}}$	1.1	1.2	1.3	1.3
x	0.15	0.31	0.44	0.54
$\epsilon_{\text{GaN}}, 10^{-3}$	-0.3	-4.6	-5.5	-6.8
$\epsilon_{\text{AlGaIn}}, 10^{-3}$	-0.8	1.6	2.1	3.4
Δa_1 , Å	0.013	0.004	0.0012	-0.004
Δa_2 , Å	-0.013	-0.004	-0.009	-0.009

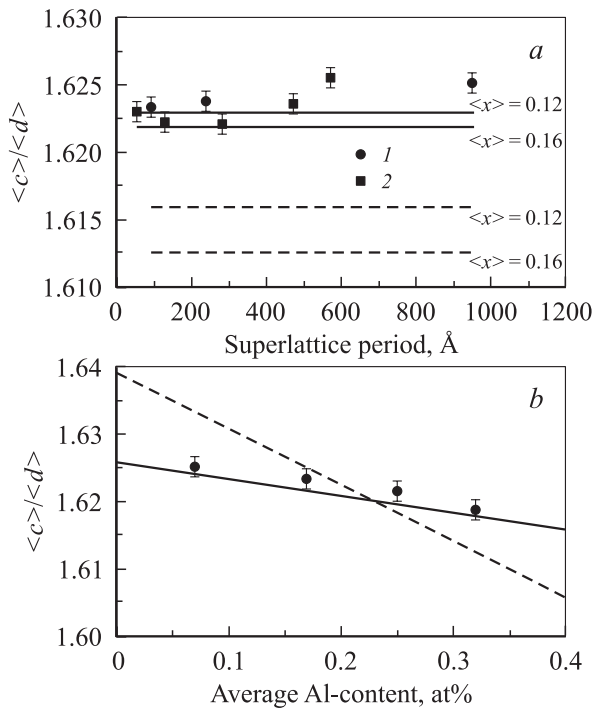


Рис. 4. Отношение экспериментально полученных средних параметров c и a сверхрешетки AlGaIn/GaN в зависимости от периода СР (при одинаковом среднем составе) (а) и от среднего состава СР при одинаковом периоде (б). 1 — для образцов, выращенных на буферном слое GaN, 2 — на буферном слое AlGaIn. Сплошные линии на части а — расчетные значения для полностью релаксированной СР, штриховые линии — нерелаксированное состояние относительно буферного слоя GaN. Штриховая линия на части б — расчет для нерелаксированного состояния относительно буферного слоя AlGaIn с составом $x_0 = 0.22$.

В абсолютном выражении деформации сжатия слоев GaN больше, чем деформация растяжения слоев AlGaIn. Это отличие вызвано в основном термоупругими напряжениями. Их можно вычислить, предполагая, что релаксация происходит при температуре роста, или оценить эмпирически, исходя из углового положения пика отражения буферного слоя GaN в симметричной лауэвской геометрии (рис. 3, а). В первом случае для термоупругого вклада $\delta\epsilon_T$ в деформацию получается значение $-2.8 \cdot 10^{-3}$, во втором — $(-1.2 \cdot 10^{-3})$. Первое значение представляется слишком большим по абсолютной величине, поскольку после его вычета из значений ϵ , приведенных в табл. 2, 3, оказывается, что СР в целом находятся в состоянии растяжения при температуре роста. Это очевидно при росте на релаксированном буферном слое GaN, но трудно объяснить физически для структур, растущих на буфере твердого раствора с содержанием Al в нем бóльшим, чем в среднем по СР. Эмпирическое значение $\delta\epsilon_T$ ближе к реальности. Однако его использование предполагает соблюдение двух условий. Во-первых, разница в термоупругих напряжениях слоев GaN и AlGaIn должна быть не очень заметна;

во-вторых, все процессы релаксации, относящиеся как к буферному слою на сапфире, так и к слоям СР на буферных слоях разного состава, должны происходить при одной и той же температуре, которая оказывается ниже температуры роста.

Если вычесть термоупругий вклад, то значения ϵ_{GaN} и ϵ_{AlGaIn} становятся близкими по абсолютной величине, что и является свидетельством того, что, как уже сказано выше, для всех исследованных СР имеет место близкая к 100% релаксация на нижней гетерогранице, т. е. снятие напряжений, возникающих между СР в целом и буферным слоем. Это удивительно, если учесть общую толщину СР (около $3 \mu\text{m}$) и относительное несоответствие между СР в целом и буферным слоем GaN порядка 0.32% и выше (исходя из среднего состава СР $\langle x \rangle = 0.15$), так что возникающие напряжения заведомо больше критических. Последнее относится и к росту на буферном слое твердого раствора, если концентрация Al в буферном слое заметно отличается от средней по СР. Если из данных табл. 2, 3 вычислить средние по периоду деформации СР при температуре релаксации, то их значения показывают наличие остаточных деформаций растяжения $\langle \epsilon \rangle \approx (0.6-1.2) \cdot 10^{-3}$ для образцов, выращенных на GaN-буфере, и почти полное (в пределах погрешности определения) снятие напряжений для структур, выращенных на буфере AlGaIn (за исключением образца 1070 с наименьшим содержанием Al).

Однако из полученных данных видно, что снятие напряжений происходит не только на нижней гетерогранице СР-буфер, но и между отдельными слоями СР. На это указывают отличные от нуля значения скачка параметра Δa_2 . Значения этой величины меняются от образца к образцу, не обнаруживая какой-либо закономерной зависимости от периода или содержания Al. Для образца с наименьшей концентрацией Al имеет место почти полная релаксация напряжений между слоями, большая степень релаксации (около 0.5) наблюдается и для самой короткопериодной СР. Для большинства структур относительный уровень релаксации r_2 находится в пределах (0.1–0.3), а слои СР 1044 и 1054 когерентны между собой ($\Delta a_2 = 0$). Такой разброс можно объяснить тем, что релаксация между слоями зависит от дефектной структуры буферных слоев и пленок, которая не в последнюю очередь определяется конкретными условиями роста того или иного образца.

Можно представить несколько путей снятия напряжений в структурах AlGaIn/GaN. Если считать, что релаксация осуществляется с помощью дислокаций, то напряжения между отдельными слоями могут частично сниматься путем изгиба прорастающих дислокаций смешанного типа с образованием горизонтальных фрагментов на гетерограницах между слоями непосредственно в процессе роста (такой механизм рассмотрен в [26]). Что касается напряжений между СР в целом и буферным слоем, то они могут релаксировать по достижении критической толщины СР через образование дислокационной сетки или пронизывающих дислокаций с большой

горизонтальной проекцией. В работе [13] предполагается другой механизм релаксации напряжений в СР AlGaN/GaN, по которому вначале слои СР растут когерентно друг относительно друга и к буферному слою. По достижении критической толщины напряжения относительно буферного слоя GaN снимаются с образованием трещин, которые, пронизывая всю структуру, являются источником образования дислокаций на границах между отдельными слоями. Однако такой процесс может происходить только в СР, испытывающих средние растягивающие напряжения относительно буферного слоя, т.е. выращенных или на GaN-буфере, или на буфере твердого раствора с содержанием Al меньшим, чем в среднем по СР (образцы № 1074 и 1075 в нашем случае). К сожалению, одних только рентгенодифракционных данных недостаточно, чтобы сделать вывод о конкретном механизме релаксации.

Таким образом, в настоящей работе проведено рентгенодифракционное исследование сверхрешеток AlGaN/GaN, выращенных на сапфире с буферным слоем GaN и AlGaN в широком интервале изменения периода СР и содержания Al. На основе анализа и моделирования дифракционных кривых симметричного брэгговского отражения с дополнительным привлечением симметричного Лауэ-рефлекса определены как средние параметры, так и состав, толщина и деформация отдельных слоев СР. Показано, что 1) оба составляющих слоя СР находятся в деформированном состоянии, при этом слои GaN испытывают деформацию сжатия по отношению к их свободным параметрам, а слои AlGaN — растяжения; 2) для исследованных СР имеет место почти полная релаксация на нижней гетерогранице между СР в целом и буферным слоем и частичное снятие напряжений между отдельными слоями СР; 3) по абсолютной величине сжатие слоев GaN больше, чем растяжение AlGaN, так что структуры в целом находятся в состоянии сжатия, что обусловлено вкладом термоупругих напряжений.

Список литературы

- [1] S. Nakamura, M. Senoh, S. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, H. Kiyoku, Y. Sugimoto, T. Kozaki, H. Uemoto, M. Sano, K. Chocho. *Appl. Phys. Lett.* **72**, 211 (1998).
- [2] O. Ambacher, J. Smart, J.R. Shealy, N.G. Weimann, K. Chu, M. Murphi, W.J. Schaff, L.F. Eastman, R. Dimitrov, L. Wittner, M. Stutzman, W. Rieger, J. Hilsenbeck. *J. Appl. Phys.* **85**, 3222 (1999).
- [3] V.Yu. Davydov, A.A. Klochikhin, I.E. Kozin, V.V. Emtsev, I.N. Goncharuk, A.N. Smirnov, R.N. Kyutt, M.P. Scheglov, A.V. Zakharov, W.V. Lundin, E.E. Zavarin, A.S. Usikov. *Phys. Stat. Sol. (a)* **188**, 863 (2001).
- [4] P. Cozodoy, M. Hansen, S.P. DenBaars, M.K. Mishra. *Appl. Phys. Lett.* **74**, 3681 (1999).
- [5] S. Tripathy, S.J. Chua, P. Chen, Z.L. Miao. *J. Appl. Phys.* **92**, 3503 (2002).
- [6] D. Korakakis, K.F. Ludwig, T.D. Moustakas. *Appl. Phys. Lett.* **72**, 1004 (1998).
- [7] R. Langer, J. Simon, O. Konovalov, N. Pelekanos, A. Barski, M. Leszczyński. *MRS-Internet J. Nitride Semicond. Res.* **3**, 46 (1998).
- [8] Cho Yong-Hoon, F. Feller, R.J. Hauenstein, G.H. Park, J.J. Song, S. Keller, U.K. Mishra, S.P. DenBaars. *J. Appl. Phys.* **85**, 3006 (1999).
- [9] A. Saxler, P. Debray, R. Perrin, S. Elhamri, W.C. Mitchel, C.R. Elsass, I.P. Smorchkova, B. Hejing, E. Haus, P. Fini, J.P. Ibbetson, S. Keller, P.M. Petroff, S.P. DenBaars, U.K. Mishra, J.S. Speck. *J. Appl. Phys.* **87**, 369 (2000).
- [10] J. Bai, T. Wang, S. Sakai. *J. Appl. Phys.* **90**, 1740 (2001).
- [11] S. Yamaguchi, M. Kosaki, Y. Watanabe, Y. Yukawa, S. Nitta, H. Amano, I. Akasaki. *Appl. Phys. Lett.* **79**, 3062 (2001).
- [12] A. Dadgar, J. Christen, T. Riemann, S. Richter, J. Blassing, A. Diez, A. Krost, A. Alam, M. Heuken. *Appl. Phys. Lett.* **78**, 2211 (2001).
- [13] S. Einfeldt, H. Heinke, V. Kirchner, D. Hommel. *J. Appl. Phys.* **89**, 2160 (2001).
- [14] M.A. Tagliente, L. De Caro, L. Tapfer, P. Waltereit, O. Brandt, K.-H. Ploog. *J. Appl. Phys.* **92**, 70 (2002).
- [15] H.-M. Wang, J.-P. Zhang, C.-Q. Chen, Q. Fareed, J.-W. Yang, M.A. Khan. *Appl. Phys. Lett.* **81**, 604 (2002).
- [16] Z. Zhong, O. Ambacher, A. Link, V. Holy, J. Stangl, R.T. Lechner, T. Roch, G. Bauer. *Appl. Phys. Lett.* **80**, 3521 (2002).
- [17] B. Heying, X. H. Wu, S. Keller, Y. Li, D. Kapolnek, B.P. Keller, S.P. DenBaars, J.S. Speck. *Appl. Phys. Lett.* **68**, 643 (1996).
- [18] T. Metzger, R. Hopler, E. Born, O. Ambacher, M. Stutzmann, R. Stommer, M. Schuster, H. Gobel, S. Christiansen, M. Albrecht, H.P. Strunk. *Phil. Mag.* **A 77**, 1013 (1998).
- [19] R. Kyutt, V. Ratnikov, G. Mosina, M. Scheglov. *Solid Stat. Phys.* **41**, 25 (1999).
- [20] V.S. Speriosu, T. Vreeland. *J. Appl. Phys.* **56**, 1591 (1984).
- [21] R.N. Kyutt, A.A. Toropov, T.V. Shubina, S.V. Sorokin, M. Karlsteen, M. Willander. *Appl. Surf. Sci.* **166**, 341 (2000).
- [22] H. Angeger, D. Brunner, F. Freudenberg, O. Ambacher, M. Stutzman, R. Hopler, T. Metzger, E. Born, G. Dollinger, A. Bergmaier, S. Karsh, H.-J. Korner. *Appl. Phys. Lett.* **71**, 1504 (1997).
- [23] D. Polan, M. Grimsditch, I. Grzegory. *J. Appl. Phys.* **79**, 3343 (1996).
- [24] V. Ratnikov, R. Kyutt, T. Shubina, T. Pashkova, E. Valcheva, B. Monemar. *J. Appl. Phys.* **88**, 6252 (2000).
- [25] V.V. Ratnikov, R.N. Kyutt, T.V. Shubina, T. Pashkova, B. Monemar. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **34**, A30 (2001).
- [26] C.G. Jiao, D. Cherns. *Inst. Phys. Conf. Ser.* **169**, 327 (2001).