

08

Ширина гетерограниц в гетероструктурах InGaAs/InAlAs/InP для квантово-каскадных лазеров, изготовленных методом молекулярно-пучковой эпитаксии

© Д.С. Папылев¹, И.И. Новиков^{1,2}, В.В. Андрияшкин^{1,2}, А.Г. Гладышев², В.В. Дюделев³, Л.Я. Карачинский^{1,2}, А.В. Бабичев¹, И.А. Няпшаев³, П.А. Юнин⁴, А.Ю. Егоров^{2,3}, Г.С. Соколовский³

¹ Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

² ООО „Коннектор Оптик“, Санкт-Петербург, Россия

³ ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

⁴ Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия

E-mail: dsrapylev@itmo.ru

Поступило в Редакцию 29 декабря 2025 г.

В окончательной редакции 20 февраля 2026 г.

Принято к публикации 2 марта 2026 г.

Методом рентгеновской рефлектометрии проведены исследования ширины гетерограниц упругокомпенсированных гетероструктур $\text{In}_{0.36}\text{Al}_{0.64}\text{As}/\text{In}_{0.67}\text{Ga}_{0.33}\text{As}$ квантово-каскадных лазеров, сформированных методом молекулярно-пучковой эпитаксии на подложке InP (001) с буферным слоем $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ различной толщины. Исследования показали, что снижение толщины буферного слоя с 500 до 100 nm не ухудшает параметры формируемых гетероструктур квантово-каскадных лазеров и сохраняет ширину гетерограниц на уровне не более одного монослоя (≤ 0.35 nm).

Ключевые слова: квантово-каскадный лазер, гетероструктура, ширина гетерограниц, молекулярно-пучковая эпитаксия, рентгеновская рефлектометрия.

DOI: 10.21883/0000000000

Шероховатость гетерограниц в гетероструктурах InGaAs/InAlAs/InP квантово-каскадных лазеров (ККЛ) среднего ИК-диапазона на подложках InP [1,2] может оказывать существенное влияние на квантовую эффективность и пороговый ток ККЛ [3,4]. Это связано с увеличением рассеяния носителей заряда на гетерограницах и нарушением когерентности излучательных электронных переходов в гетероструктурах ККЛ. Помимо наличия шероховатости гетерограницы могут иметь градиент гетероперехода, обусловленный перемешиванием материалов на границе из-за их взаимной диффузии и/или в процессе роста. Такой градиент гетероперехода, формируя размытый профиль потенциальных барьеров и ям в энергетической диаграмме, приводит к изменению энергий уровней размерного квантования [5], отличных от рассчитанных для конфигурации с резкими гетерограницами. В результате это может влиять на дифференциальную эффективность и пороговый ток [6], а также приводить к отклонению длины волны излучения ККЛ от проектируемой [7]. В совокупности шероховатость и градиент гетероперехода определяют ширину гетерограниц и влияют на функциональные характеристики ККЛ, поэтому контроль и минимизация ширины гетерограниц на атомарном уровне являются критически важными для улучшения характеристик ККЛ.

Важным этапом в эпитаксиальном процессе является предварительная подготовка подложки, направленная на удаление естественного окисла с поверхности подложек за счет термического отжига. Однако применение

отжига приводит к увеличению шероховатости подложки [8], поэтому перед эпитаксией функциональных слоев гетероструктуры требуется формирование буферного слоя, обеспечивающего выполаживание поверхности. Ранее в работе [9] исследовалось влияние морфологии подложек InP на шероховатость гетерограниц гетероструктур ККЛ, выращенных методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) на буферном слое InP, который был предварительно выращен на подложке InP (001) методом металлоорганической газофазной эпитаксии (МОГФЭ). Было показано, что при формировании методом МПЭ гетероструктур ККЛ на буферном слое $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ толщиной 50 nm шероховатость гетерограниц в квантовых каскадах зависит от морфологии поверхности подложки InP. В работе [10] также указывается, что при выращивании слоя GaAs на подложке GaAs методом МОГФЭ наблюдается значительная зависимость шероховатости эпитаксиального слоя от исходной шероховатости подложки и предварительной очистки поверхности от окислов. С другой стороны, в работе [11] показано, что при выращивании методом МПЭ буферного слоя GaAs на подложках GaAs наблюдается значительное снижение среднеквадратичной шероховатости поверхности, которое достигается при толщине слоя GaAs 100 nm, а при толщине 500 nm шероховатость поверхности совсем не зависит от морфологии подложки.

Поскольку ширина гетерограниц формируется как с учетом градиента гетероперехода, контролируемого подбором условий эпитаксиального роста, так и с уче-

том шероховатости гетерограниц, на которую влияет морфология стартовой поверхности эпитаксиального роста, при подобранных условиях эпитаксии требуется обеспечить планаризацию поверхности буферного слоя, зависящую от толщины этого слоя. Целью настоящей работы является исследование влияния толщины буферного слоя $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, выращенного на поверхности подложки InP (001) диаметром 50.8 mm, на ширину гетерограниц упругокомпенсированных гетероструктур $\text{In}_{0.36}\text{Al}_{0.64}\text{As/In}_{0.67}\text{Ga}_{0.33}\text{As}$ квантово-каскадных лазеров общей толщиной 0.5 μm , выращенных непосредственно после формирования буферного слоя. В таких гетероструктурах выбор толщины буферного слоя $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, показатель преломления которого отличается от показателя преломления подложки InP , влияет на распределение световой волны в волноводе ККЛ и соответственно влияет на характеристики ККЛ [12]. В связи с этим определение минимальной достаточной толщины буферного слоя, обеспечивающей выполаживание поверхности и совместимой с требованиями к распределению световой волны в волноводе ККЛ, представляет существенный практический интерес. Данное исследование направлено на решение этой задачи путем выращивания и анализа гетероструктур с различной толщиной буферного слоя.

Для выращивания методом МПЭ гетероструктур, которые исследуются в настоящей работе, использовались подложки InP (001) с качеством полированной поверхности „epi-ready“. Для удаления естественного окисла с поверхности подложки перед проведением процесса эпитаксии после предварительного отжига при температуре $300 \pm 10^\circ\text{C}$ был проведен высокотемпературный отжиг при температуре $530 \pm 10^\circ\text{C}$ в течение 10 min. В это время с поверхности полупроводниковой пластины удаляется естественный оксид, а также происходит модификация поверхности подложки, которая была подвергнута принудительной шлифовке и полировке. Такая модификация выражается в появлении на поверхности пластины рельефа, который сопровождается появлением картины точечной дифракции быстрых электронов. Подобная картина свидетельствует о том, что поверхность не гладкая на атомарном уровне, т.е. присутствует шероховатость.

Эпитаксиальный процесс начинался с формирования буферного слоя $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ толщиной 100 или 500 nm (образцы $B100$ или $B500$ соответственно). Во время выращивания буферного слоя происходило выравнивание поверхности, что подтверждалось появлением характерных полос в картине дифракции быстрых электронов. Далее формировалась активная область ККЛ суммарной толщиной 500 nm, состоящая из десяти каскадов чередующихся слоев твердых растворов $\text{In}_{0.36}\text{Al}_{0.64}\text{As/In}_{0.67}\text{Ga}_{0.33}\text{As}$ с толщинами слоев в диапазоне 1.3–4.3 nm и общей толщиной каскада 50.4 nm. Конструкция активной области подробнее описана в [9]. Сверху выращивался покрывающий слой $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ толщиной 50 nm. Ширина гетерограниц в гетероструктурах исследовалась методом малоугловой рентгеновской

рефлектометрии (РР) с использованием дифрактометра PANalytical X'Pert PRO MRD в схеме высокого разрешения с гибридным монохроматором на первичном пучке, состоящим из параболического рентгеновского зеркала и Ge (400) монохроматора четырехкратного отражения ($\text{CuK}\alpha_1$ -излучение). Для съемки кривых проводилось 2θ – ω -сканирование с узкими щелями на первичном и отраженном пучках зеркального отражения от предварительно съюстированного образца.

Рентгеновская рефлектометрия основана на анализе зависимости интенсивности зеркально отраженного рентгеновского излучения от угла падения ω . Кривая рефлектометрии содержит информацию о профиле по глубине электронной плотности, усредненной в плоскости образца, основываясь на которой можно определить толщину и плотность материала, а также ширину гетерограниц слоев. По этой причине в методе рентгеновской рефлектометрии в отличие, например, от широко распространенного метода атомно-силовой микроскопии [13] определяется общая ширина гетерограницы, которая включает как шероховатость границы, так и перемешивание материалов. Так как оба этих фактора одинаково негативно влияют на свойства ККЛ, РР является более информативным методом для исследования.

Результаты измерений РР в зависимости от угла отраженного излучения 2θ для образцов $B100$ и $B500$ представлены на рис. 1. Исходя из совпадения углового положения пиков толщина слоев в квантовых каскадах не различается, что указывает на хорошую воспроизводимость при последовательном росте этих гетероструктур. На вставке к рис. 1 кривые РР для образцов $B100$ и $B500$ совмещены по интенсивности. Увеличение ширины гетерограниц существенно снижает интенсивность пиков кривой РР, что наиболее выражено проявляется с увеличением угла сканирования [9]. Практически полное совпадение косвенно указывает на близкие значения ширин гетерограниц в двух рассматриваемых гетероструктурах.

Для количественной оценки ширин гетерограниц кривые РР были смоделированы на основе формализма Парратта [14] с использованием модели гетерограниц Нево–Кросе [15]. В ходе численного моделирования для достижения наилучшего согласия расчетных кривых с зарегистрированными экспериментальными кривыми варьировались толщины слоев $\text{In}_{0.36}\text{Al}_{0.64}\text{As/In}_{0.67}\text{Ga}_{0.33}\text{As}$ и среднеквадратичная ширина гетерограниц. Значения ширин гетерограниц задавались равными для всех периодов. На рис. 2 и 3 представлено сравнение результатов измерения и моделирования, которое демонстрирует их хорошее согласие при значениях ширин гетерограниц, приведенных в таблице.

Результаты моделирования (см. таблицу) показывают, что ширина гетерограниц в квантовых каскадах рассматриваемых гетероструктур составляет 0.33–0.35 и 0.29–0.30 nm для гетерограниц InAlAs/InGaAs и InGaAs/InAlAs соответственно. Толщина каскадов гетероструктур составила 49.3 и 49.2 nm для образцов

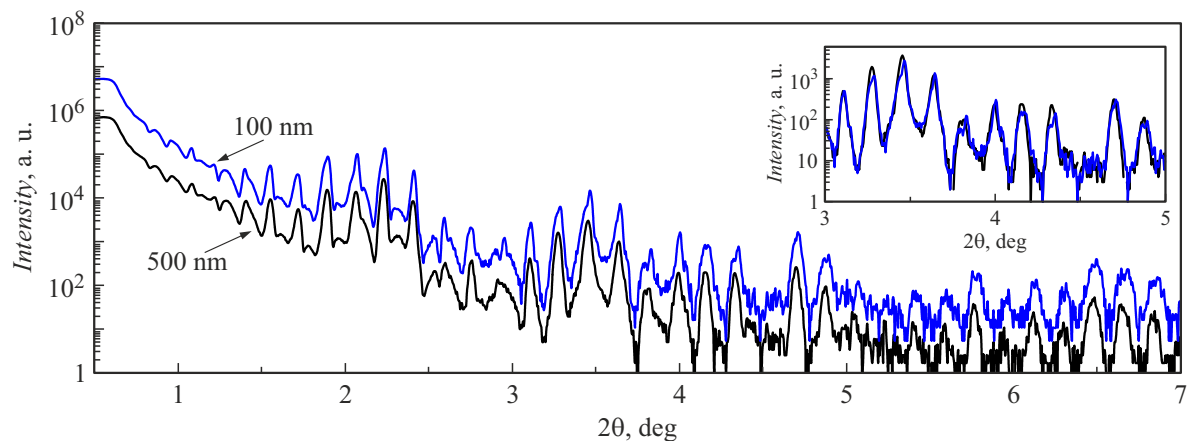


Рис. 1. Кривые рентгеновской рефлектометрии для образцов *B100* и *B500*. Кривые смещены по вертикальной оси относительно друг друга для наглядности. На вставке изображен увеличенный фрагмент с совмещенными по интенсивности кривыми.

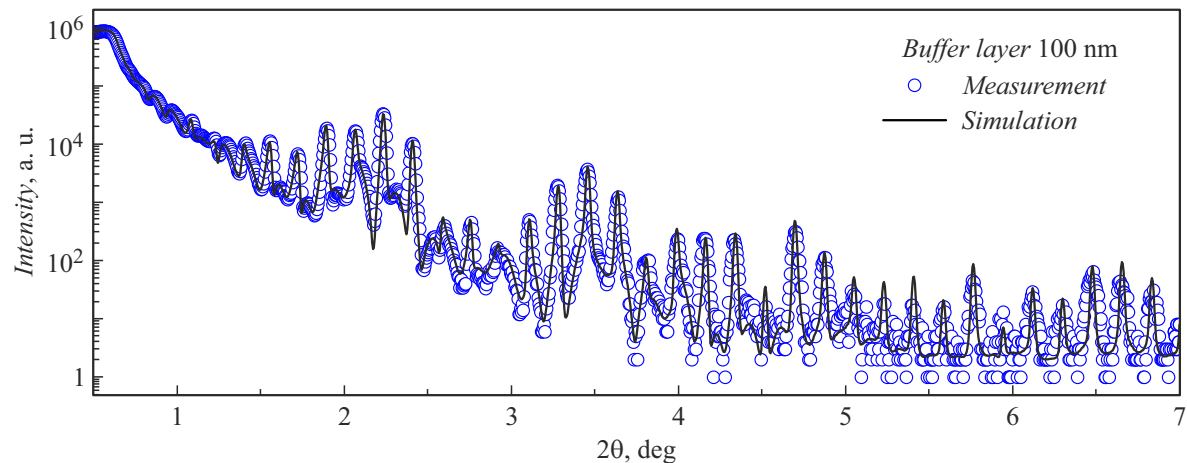


Рис. 2. Смоделированная и измеренная кривые рентгеновской рефлектометрии образца *B100*.

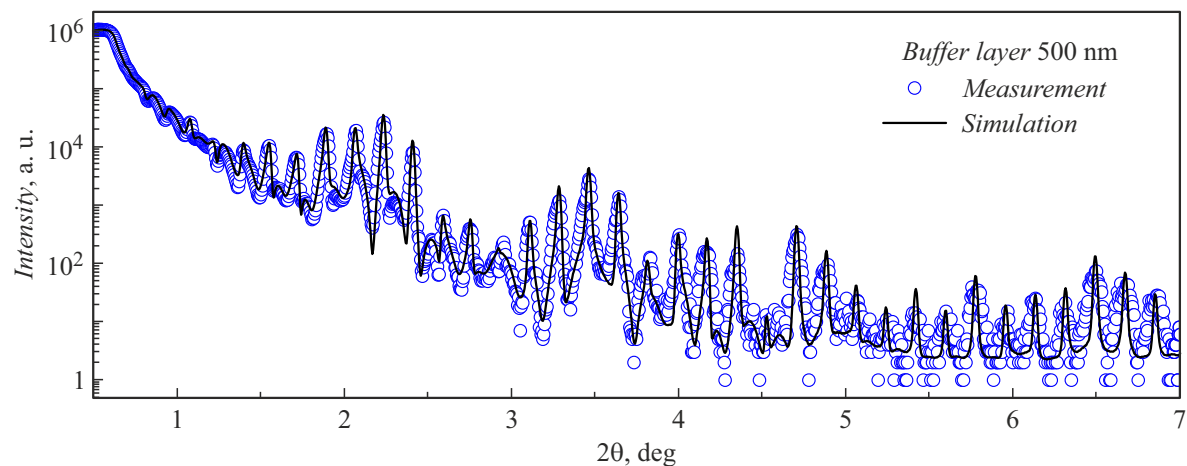


Рис. 3. Смоделированная и измеренная кривые рентгеновской рефлектометрии образца *B500*.

Результаты моделирования кривых рентгеновской рефлектометрии

Эпитаксиальный слой	Ширина гетерограниц, nm	
	Образец B100	Образец B500
InAlAs	0.33 ± 0.09	0.35 ± 0.08
InGaAs	0.29 ± 0.07	0.30 ± 0.07

B100 и B500 соответственно при толщине наиболее тонкого слоя 1.2 nm.

С учетом небольших различий в ширинах гетерограниц и толщинах каскадов между образцами, которые малы по сравнению с постоянной кристаллической решетки материала, полученные результаты свидетельствуют о высокой воспроизводимости процесса МПЭ и стабильности роста гетероструктур ККЛ. Важными параметрами эпитаксиального процесса, которые позволяют достичь указанного эффекта, являются температура, при которой проходит эпитаксия, и поток элементов пятой группы. В нашем случае, при выращивании слоев InGaAs и InAlAs с высоким содержанием индия, оптимальным является эпитаксия при пониженной (относительно температуры предварительного отжига подложки) температуре 490 ± 10 °C. При этом для повышения подвижности атомов третьей группы на эпитаксиальной поверхности используется относительно низкое соотношение потоков элементов третьей и пятой групп — 1 к 3. В результате удается создавать многослойные гетероструктуры с шириной гетерограниц на уровне одного монослоя атомов. Для обеспечения однородности толщины эпитаксиальных слоев по площади пластины и идентичности толщин слоев в каждом каскаде гетероструктуры ККЛ в установках МПЭ применяется вращение носителя с полупроводниковыми пластинами. При выращивании толстых слоев, где допустимы незначительные отклонения толщины, скорость вращения выбирается невысокой: высокие обороты ускоряют износ дорогостоящих подшипников высоковакуумного реактора. Однако для гетероструктур ККЛ с толщиной слоев в квантовых каскадах 1–2 nm и продолжительностью роста 5–10 s скорость вращения повышается. В нашем случае скорость вращения была увеличена до 40 rpm (типичное значение 20 rpm) для достижения повышенной однородности.

Важно понимать, что глубина проникновения рентгеновского излучения в образец в методе РР зависит от угла падения ω , т.е. она увеличивается с увеличением угла 2θ на кривой РР. При используемом в настоящей работе диапазоне углов сканирования излучение проникает в гетероструктуру на глубину до порядка 1 μm , достигая подложки. При измерении методом РР значение ширины гетерограниц усредняется по облучаемой площади, но не по глубине, так как рассеянное излучение складывается с учетом фазы (а не просто по

интенсивности, как при сложении по площади). При моделировании кривых РР предполагалось, что ширина гетерограниц не уменьшалась и не увеличивалась в процессе выращивания гетероструктуры ККЛ, т.е. была постоянной от буферного слоя до поверхности. Это вполне реалистичный сценарий при правильном режиме роста. Переменная ширина гетерограниц может проявляться на кривой РР в сильном ухудшении контраста и уменьшении амплитуды осцилляций с ростом угла 2θ либо, наоборот, в малоинформативности кривой РР при малых углах и увеличении контраста осцилляций с ростом угла 2θ . На экспериментальных кривых РР такого эффекта не наблюдается, что позволяет уверенно говорить о постоянной ширине гетерограниц на протяжении роста всей гетероструктуры. В нашем случае это также подтверждается хорошим совпадением результатов моделирования и экспериментальных кривых.

Отсутствие значимой зависимости ширины гетерограниц активной области от толщины буферного слоя в диапазоне 100–500 nm позволяет сделать важный практический вывод, что уже при толщине буферного слоя в 100 nm происходит полное нивелирование морфологии подложки, деградировавшей при предварительном термическом отжиге. Небольшое превышение ширины гетерограниц InAlAs по сравнению с шириной InGaAs (см. таблицу) находится в пределах погрешности и может быть связано с различной кинетикой поверхностных процессов и скоростью миграции адатомов для этих материалов в условиях МПЭ.

В работе [9] было показано, что формирование толстого буфера InP методом МОГФЭ с последующим ростом слоя InGaAs толщиной 50 nm методом МПЭ не обеспечивает требуемого нивелирования влияния морфологии подложки. Полученные в настоящей работе результаты при толщинах МПЭ буферных слоев InGaAs 100 и 500 nm в целом согласуются с результатами работы [11], продемонстрировавшими эффективность применения метода МПЭ при формировании буферного слоя в системе GaAs/GaAs. Определенные значения ширины гетерограниц в исследуемых гетероструктурах в несколько раз меньше толщины самых тонких слоев (1.2 nm) активной области, что позволяет изготавливать активную область ККЛ с высокой точностью, соответствующей проектируемой конфигурации энергетических уровней. Отметим, что для гетероструктур, выращенных методом МОГФЭ, ширины гетерограниц, определенные методом масс-спектрометрии вторичных ионов, могут составлять 2.5–4.5 nm [7]. Аналогичным методом в работе [16] для МОГФЭ-гетероструктур продемонстрирована меньшая ширина гетерограниц, составляющая по профилю концентрации Ga и Al около 0.5 nm, однако при этом профиль концентрации In был более размытым и ширина гетерограниц по профилю In достигала величины порядка 1 nm. Выявленный в методе масс-спектрометрии вторичных ионов размытый профиль содержания In определяется, в частности, сегрегацией атомов In, проявляющейся как при МОГФЭ-росте, так

и при МПЭ-росте. Однако было показано [6], что сегрегация более выражена при использовании МОГФЭ и, в частности, является возможной причиной уширения спектра излучения катодолюминесценции по сравнению со случаем выращивания гетероструктур методом МПЭ. Рассматривая влияние параметров гетерограниц на выходные характеристики лазера, авторы работы [17] выявили сравнительно большие значения шероховатости, а также ширины градиента гетеропереходов в ККЛ в гетероструктурах, изготовленных методом МОГФЭ (0.55 nm), по сравнению со случаем МПЭ-роста (0.4 nm). Показательно и существенное различие в рекордных значениях эффективности при комнатной температуре для ККЛ, сформированных МПЭ (31 %) [18] и МОГФЭ (19.1 %) [17]. На основании приведенных результатов, а также результатов настоящей работы можно утверждать, что метод МПЭ является более предпочтительным для формирования гетероструктур активной области ККЛ.

Таким образом, методами рентгеновской рефлектометрии и моделирования кривых рефлектометрии проведен анализ ширин гетерограниц упругокомпенсированных гетероструктур $\text{In}_{0.36}\text{Al}_{0.64}\text{As}/\text{In}_{0.67}\text{Ga}_{0.33}\text{As}$ квантово-каскадных лазеров, сформированных методом МПЭ на буферном слое $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ различной толщины, выращенном на подложке InP (001). Исследования показали, что толщина буферного слоя как 100 nm, так и 500 nm при указанных условиях эпитаксии обеспечивает последующее формирование гетероструктур квантово-каскадных лазеров с шириной гетерограниц не более 0.35 nm. Полученные значения ширин гетерограниц соответствуют толщине одного монослоя материала и наглядно демонстрируют преимущества метода МПЭ для выращивания активной области ККЛ по сравнению с методом МОГФЭ.

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] А.В. Бабичев, А. Bousseksou, Н.А. Пихтин, И.С. Тарасов, Е.В. Никитина, А.Н. Софронов, Д.А. Фирсов, Л.Е. Воробьев, И.И. Новиков, Л.Я. Карачинский, А.Ю. Егоров, ФТП, **50** (10), 1320 (2016). [A.V. Babichev, A. Bousseksou, N.A. Pikhtin, I.S. Tarasov, E.V. Nikitina, A.N. Sofronov, D.A. Firsov, L.E. Vorobjev, I.I. Novikov, L.Ya. Karachinsky, A.Yu. Egorov, Semiconductors, **50** (10), 1299 (2016). DOI: 10.1134/S1063782616100067].
- [2] А.В. Бабичев, А.С. Курочкин, Е.С. Колодезний, А.В. Филимонов, А.А. Усикова, В.Н. Неведомский, А.Г. Гладышев, Д.В. Денисов, Л.Я. Карачинский, И.И. Новиков, А.Ю. Егоров, ФТП, **52** (6), 597 (2018). DOI: 10.21883/FTP.2018.06.45922.8751 [A.V. Babichev, A.S. Kurochkin, E.S. Kolodeznyi, A.V. Filimonov, A.A. Usikova, V.N. Nevedomsky, A.G. Gladyshev, L.Ya. Karachinsky, I.I. Novikov, A.Yu. Egorov, Semiconductors, **52** (6), 745 (2018). DOI: 10.1134/S1063782618060039].
- [3] Y.V. Flores, S.S. Kurlov, M. Elagin, M.P. Semtsiv, W.T. Masselink, Appl. Phys. Lett., **103** (16), 161102 (2013). DOI: 10.1063/1.4825229
- [4] K.A. Krivas, D.O. Winge, M. Franckić, A. Wacker, J. Appl. Phys., **118** (11), 114501 (2015). DOI: 10.1063/1.4930572
- [5] X. Lü, L. Schrottke, E. Luna, H.T. Grahn, Appl. Phys. Lett., **104**, 232106 (2014). DOI: 10.1063/1.4882653
- [6] C.A. Wang, B. Schwarz, D.F. Siriani, L.J. Missaggia, M.K. Connors, T.S. Mansuripur, D.R. Calawa, D. McNulty, M. Nickerson, J.P. Donnelly, K. Creedon, F. Capasso, IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron., **23** (6), 1200413 (2017). DOI: 10.1109/JSTQE.2017.2677899
- [7] C.A. Wang, B. Schwarz, D.F. Siriani, M.K. Connors, L.J. Missaggia, D.R. Calawa, D. McNulty, A. Akey, M.C. Zheng, J.P. Donnelly, T.S. Mansuripur, F. Capasso, J. Cryst. Growth, **464**, 215 (2017). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2016.11.029
- [8] S. Ritchie, S.R. Johnson, C. Lavoie, J.A. Mackenzie, T. Tiedje, R. Streater, Surf. Sci., **374** (1-3), 418 (1997). DOI: 10.1016/S0039-6028(96)00808-4
- [9] Д.С. Папылев, И.И. Новиков, В.В. Андрияшкин, А.Г. Гладышев, В.В. Дюделев, Л.Я. Карачинский, А.В. Бабичев, И.А. Няпшаев, А.Ю. Егоров, Г.С. Соколовский, ФТП, **59** (7), 439 (2025). DOI: 10.61011/FTP.2025.07.62009.8580 [D.S. Papylev, I.I. Novikov, V.V. Andryushkin, A.G. Gladyshev, V.V. Dudelev, L.Ya. Karachinsky, A.V. Babichev, I.A. Nyapshaev, A.Yu. Egorov, G.S. Sokolovskii, Semiconductors, **59** (7), 403 (2025).].
- [10] D. Allwood, N. Mason, A. Mowbray, R. Palmer, J. Cryst. Growth, **248**, 108 (2003). DOI: 10.1016/S0022-0248(02)02043-2
- [11] S.Y. Lehman, A. Roshko, R.P. Mirin, K.A. Bertness, T.E. Harvey, K.D. Cobry, J. Vac. Sci. Technol. B, **27**, 1072 (2009). DOI: 10.1116/1.3119684
- [12] I.I. Novikov, A.V. Babichev, V.E. Bugrov, A.G. Gladyshev, L.Ya. Karachinsky, E.S. Kolodeznyi, A.S. Kurochkin, A.V. Savelyev, G.S. Sokolovskii, A.Yu. Egorov, J. Phys.: Conf. Ser., **929** (1), 012082 (2017). DOI: 10.1088/1742-6596/929/1/012082
- [13] W. Tian, D.L. Zhang, X.T. Zheng, R.K. Yang, Y. Liu, L.D. Lu, L.Q. Zhu, Front. Mater., **9**, 1050205 (2022). DOI: 10.3389/fmats.2022.1050205
- [14] L.G. Parratt, Phys. Rev., **95** (2), 359 (1954). DOI: 10.1103/PhysRev.95.359
- [15] L. Nevot, P. Croce, Rev. Phys. Appl., **15** (3), 761 (1980). DOI: 10.1051/rphysap:01980001503076100
- [16] M. Bugajski, A. Kolek, G. Haldaś, W. Strupiński, I. Pasternak, W. Kołkowski, K. Pierściński, Photonics, **11** (12), 1195 (2024). DOI: 10.3390/photonics11121195
- [17] D. Botez, S. Suri, H. Gao, T. Grange, J.D. Kirch, L.J. Mawst, R.A. Marsland, Photonics, **12** (2), 93 (2025). DOI: 10.3390/photonics12020093
- [18] M. Razeghi, Y. Bai, F. Wang, Light Sci. Appl., **14** (1), 252 (2025). DOI: 10.1038/s41377-025-01935-6