

# Структурные и оптические свойства низкотемпературных МОС-гидридных гетероструктур AlGaAs/GaAs (100) на основе твердых растворов вычитания

© П.В. Середин<sup>¶</sup>, А.В. Готов, Э.П. Домашевская, И.Н. Арсентьев<sup>¶¶</sup>,  
Д.А. Винокуров\*, А.Л. Станкевич\*, И.С. Тарасов\*

Воронежский государственный университет,  
394006 Воронеж, Россия

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

(Получена 29 апреля 2009 г. Принята к печати 30 апреля 2009 г.)

Методами рентгеновской дифракции, сканирующей электронной микроскопии и ИК-спектроскопии на отражение изучены свойства эпитаксиальных МОС-гидридных гетероструктур AlGaAs/GaAs(100), выращенных при пониженных температурах. Установлено, что изменение параметра кристаллической решетки твердых растворов AlGaAs от концентрации Al не подчиняется классическому закону Vegarda, а значения параметров меньше, чем у GaAs.

PACS: 64.70.N..., 68.37.-d, 68.55.-a

## 1. Введение

Эпитаксиальные твердые растворы AlGaAs, выращенные на подложках GaAs, представляют собой наиболее согласованную по параметру кристаллической решетки гетероструктуру, которая получила широкое распространение и является одним из наиболее используемых компонентов электронной и оптоэлектронной техники. Исследования системы AlAs–GaAs ведутся достаточно давно и на сегодняшний день все основные свойства ее полупроводниковых твердых растворов прекрасно изучены, а различные их зависимости являются справочными величинами. Однако, как уже было не один раз показано, влияние различных факторов, таких как неравновесные термодинамические процессы в реакторах, наличие полей деформации, возникающих из-за малейших рассогласований параметров решетки пленки и подложки [1–3], даже в такой хорошо изученной системе позволяют получать у этого типа гетероструктур принципиально новые свойства.

Так, в ряде работ было показано, что в гетероструктурах AlGaAs/GaAs (100) при  $x \approx 0.50$  возможно образование сверхструктурной фазы AlGaAs<sub>2</sub>. Решетку такой фазы упорядочения можно описать структурой InGaAs<sub>2</sub>-типа (Layered Tetragonal) [4] с [100]-направлением упорядочения. В этой структуре элементарная ячейка соответствует двум ячейкам типа сфалерита, поставленным друг на друга вдоль оси  $c$ . Отношение  $c/2a$ , наблюдаемое в фазе AlGaAs<sub>2</sub>, было меньше единицы и составляло величину  $\sim 0.997$ , что не противоречит литературным данным [5].

Уменьшение параметра решетки у обнаруженной сверхструктуры AlGaAs<sub>2</sub> объяснялось тем фактом, что в идеальном твердом растворе AlGaAs распределение

атомов Al и Ga в подрешетке металла происходит статистическим образом, и параметр решетки соответственно представляет собой среднюю величину периода кристаллической решетки для множества ячеек. В случае же сверхструктуры образуется химическое соединение AlGaAs<sub>2</sub>. В результате за счет слоевого упорядочения расположения атомов Al и Ga в подрешетке. В результате за счет слоевого упорядочения расположения атомов Al и Ga в подрешетке A<sup>III</sup> происходит так называемое тетрагональное сжатие и параметр фазы AlGaAs<sub>2</sub>  $c < 2a_{Al0.50Ga0.50As}$ . При этом параметр  $c$  направлен по нормали к плоскости (100), т.е. тетрагональное сжатие элементарной ячейки происходило в направлении роста эпитаксиальной пленки.

Что касается закона Vegarda, то для твердых растворов в системе AlAs–GaAs литературные данные дают неоднозначные сведения о его характере (линейном или нелинейном) [6,7]. При этом важно отметить, что зависимость параметра кристаллической решетки от концентрации входящих в нее атомов для неупорядоченных гомоморфных твердых растворов AlGaAs, в том числе в тех, в которых было обнаружено упорядочение, подчинялась линейному закону Vegarda [2], и с ростом концентрации Al параметр решетки твердого раствора увеличивался относительно параметра монокристаллической подложки GaAs. При этом сверхструктурная фаза AlGaAs<sub>2</sub> по своему параметру отличалась от параметра GaAs в меньшую сторону и не удовлетворяла существующему закону Vegarda [2,3].

Кроме того, возникновение сверхструктурной фазы проявляется в усложнении ИК-спектров отражения, а также в образовании упорядоченного нанорельефа на поверхности гетероструктуры, с шагом структурирования, кратным параметру кристаллической решетки сверхструктурной фазы AlGaAs<sub>2</sub>.

<sup>¶</sup> E-mail: Paul@phys.vsu.ru

<sup>¶¶</sup> E-mail: Arsentyev@mail.ioffe.ru

**Таблица 1.** Состав и толщины слоев гетероструктур AlGaAs/GaAs(100)

Образец	$x$	$d$ , мкм
EM1017	0.50	~ 1.0
EM1540	0.00	~ 1.2
EM1555	0.60	~ 2.0
EM1585	0.40	~ 1.5

Таким образом, получение новых химических соединений в системе AlAs–GaAs представляет несомненный интерес, а свойства таких соединений заслуживают тщательного изучения различными методами, поскольку модификация фундаментальных свойств, обусловленная понижением симметрии сфалеритной структуры соединений  $A^{III}B^V$ , должна привести к изменению ширины запрещенной зоны, возможному переходу от непрямозонного к прямозонному полупроводнику, инверсному порядку следования зон, усложнению оптических спектров в результате снятия вырождения с состояний.

## 2. Объекты и методы исследования

Тестируемые образцы, представляющие собой гетероструктуры AlGaAs/GaAs(100), выращивались с целью исследования процессов автолегирования для достижения максимальной концентрации углеродного акцептора. Для этого проводились эксперименты при пониженной температуре и минимальном (3–5) соотношении V и III групп элементов в зависимости от задаваемого состава твердого раствора.

Образцы EM1540, EM1555, EM1585 выращивались на установке МОС-гидридной эпитаксии EMCORE GS 3/100 в вертикальном реакторе с высокой скоростью вращения подложкодержателя. Температура подложкодержателя поддерживалась 550°C, давление в реакторе 77 Торр, скорость вращения подложкодержателя 1000 об/мин. В качестве исходных реагентов использовались триметил галлия  $Ga(CH_3)_3$ , триметил алюминия  $Al(CH_3)_3$  и арсин  $AsH_3$ . Толщина и состав выращиваемых слоев рассчитывалась исходя из данных, определенных по слоям, выращиваемым при „нормальных условиях“ (температура роста 700–800°C, соотношение элементов V и III групп ~ 100–200). Для сравнения свойств образцов, полученных по новой методике и при нормальных условиях, использовался образец EM1017, выращенный по обычной технологии.

Предполагаемые составы и толщины образцов приведены в табл. 1.

Структурное качество образцов и определение параметров решеток твердых растворов проводили с использованием рентгеновской дифракции на дифрактометре ARL X'TRA Thermo Techno с высоким угловым разрешением на  $Cu_{K\alpha 1,2}$ -излучении. ИК-спектры отражения

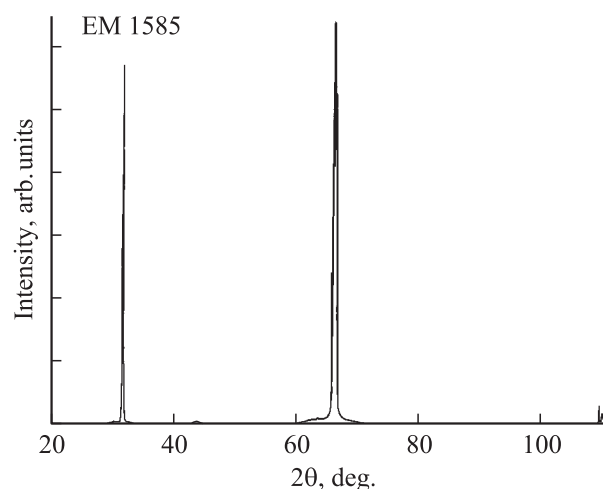
от гетероструктур были получены с использованием ИК-фурье-спектрометра Vertex-70 Bruker. Изучение морфологии поверхности было проведено на растровом электронном микроскопе JOEL, концентрации элементов в твердом растворе были уточнены методом рентгеновского микроанализа с использованием приставки Oxford Instruments.

## 3. Результаты исследований и их обсуждение

### 3.1. Рентгеноструктурные исследования

На рис. 1 приведена обзорная дифрактограмма эпитаксиальной гетероструктуры AlGaAs/GaAs(100) (образец EM1585) в интервале углов  $2\theta$ : 20–120°. Как видно из рисунка, на ней присутствуют три рефлекса, которые можно получить ввиду ориентации роста гетероструктуры [100]: это дифракция от плоскостей (200), (400), (600). Никаких других дополнительных отражений получено не было, что свидетельствует об образовании твердого раствора с кубической структурой сфалерита.

Точное определение параметра кристаллической решетки твердых растворов играет важную роль, особенно при дальнейших расчетах таких величин, как внутренние напряжения. Сводя к минимуму инструментальную ошибку в нахождении угла дифракции (используя дифрактометры высокого разрешения), наивысшая точность в определении параметра может быть достигнута при использовании последних (дальних) дифракционных линий. Поэтому изучение композиционного состава и структурного качества исследуемых в работе образцов гетероструктур проводили по профилям дифракционных линий (600) в интервале углов 109–111°. Точность определения межплоскостных расстояний и параметров решетки составляла ~ 0.0001 Å.

**Рис. 1.** Обзорная дифрактограмма автоэпитаксиального образца EM1585.

Постоянная решетки твердых растворов  $a^v$  с учетом упругих напряжений в гетероэпитаксиальном слое в соответствии с линейной теорией упругости может быть рассчитана как [3]

$$a^v = a^\perp \frac{1-v}{1+v} + a^\parallel \frac{2v}{1+v}, \quad (1)$$

где  $v$  — коэффициенты Пуассона для эпитаксиальных слоев,  $a^\perp$  и  $a^\parallel$  — перпендикулярная и параллельная составляющие параметра решетки.

Таким образом, выражения для параметра решетки эпитаксиальных слоев AlGaAs:

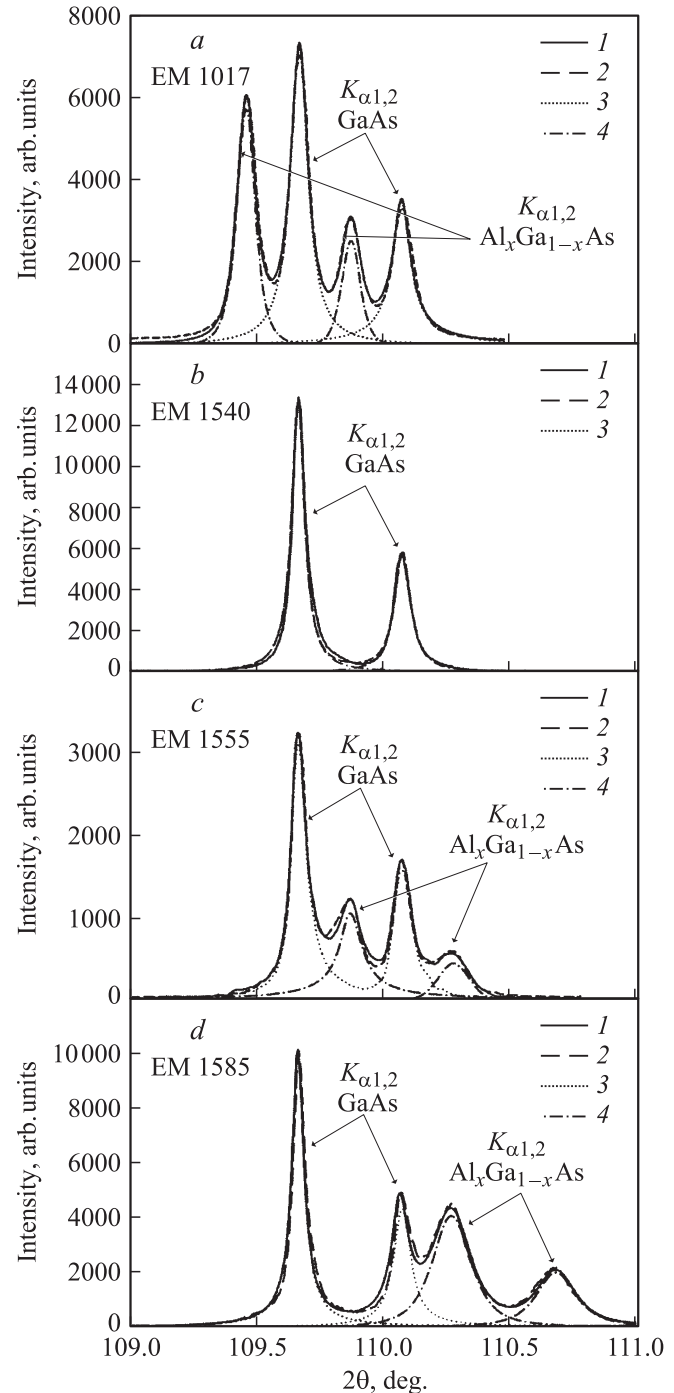
$$a_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}} = a_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}}^\perp \frac{1 - v_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}}}{1 + v_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}}} + a_{\text{GaAs}}^\parallel \frac{2v_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}}}{1 + v_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}}}, \quad (2)$$

где  $v_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}} = xv_{\text{AlAs}} + (1-x)v_{\text{GaAs}}$ , и соотношение (3) могут быть записаны как

$$a_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}}^v = a_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}}^\perp \frac{1 - (xv_{\text{AlAs}} + (1-x)v_{\text{GaAs}})}{1 + (xv_{\text{AlAs}} + (1-x)v_{\text{GaAs}})} + a_{\text{GaAs}}^\parallel \frac{2(xv_{\text{AlAs}} + (1-x)v_{\text{GaAs}})}{1 + (xv_{\text{AlAs}} + (1-x)v_{\text{GaAs}})}. \quad (3)$$

На рис. 2, *a* приведен профиль рентгеновской дифракции от эпитаксиальной гетероструктуры AlGaAs/GaAs(100) (образец EM1017). Твердый раствор этой гетероструктуры выращен методом MOCVD при стандартных условиях. Как видно из рисунка, дифракция от плоскости (600) представляет наложение двух  $K\alpha_{1,2}$ -дублетов: первый, смещенный в сторону меньших углов — от твердого раствора AlGaAs, второй — от монокристаллической подложки GaAs(100). Разложение дифракционных профилей на составляющие проводили с помощью программного пакета SigmaPlot 10, позволяющего минимизировать погрешности разложения и автоматизировать процесс подбора моделирующего профиля. Моделирование экспериментального профиля дифракции начинали с выделения  $K\alpha_{1,2}$ -дублета подложки GaAs(100). Для этого из общего профиля вычитали дублет от подложки GaAs(100), учитывая, что в силу своей малой толщины,  $\sim 1$  мкм, эпитаксиальная пленка незначительно ослабляет брэгговское отражение от подложки, так как слой половинного ослабления рентгеновского излучения для нашей системы составляет  $\sim 17$  мкм. Далее из полученной дифракционной кривой выделяли дифракцию от твердого раствора. На основании полученных данных была определена полуширина дифракционных  $K\alpha_{1,2}$ -дублетов и рассчитаны межплоскостные расстояния. Расчет параметра кристаллической решетки твердого раствора с учетом внутренних напряжений проводился в соответствии с выражениями (1)–(3), причем используемые для вычислений коэффициенты Пуассона были взяты из литературных данных:  $v_{\text{AlAs}} = 0.255$  [8,9],  $v_{\text{GaAs}} = 0.312$  [10]. Данные,

полученные по вышеописанной методике, позволяют сделать заключение о том, что параметр решетки с учетом внутренних напряжений для твердого раствора AlGaAs образца EM1017 удовлетворяет закону Вегарда для системы AlAs–GaAs [7].



**Рис. 2.** Профили рентгеновской дифракции от плоскости (600) для исследованных гетероструктур: *a* — образец EM1017, *b* — образец EM1540, *c* — образец EM1555, *d* — образец EM1585. Линии на рисунках: 1 — эксперимент, 2 — модель, 3 — подложка GaAs(100), 4 — твердый раствор AlGaAs.

**Таблица 2.** Результаты рентгеновского дифракционного анализа и рентгеновского микроанализа гетероструктур AlGaAs/GaAs (100)

Гетероструктура		Полуширина, $\Delta\theta^\circ$	$a_{\text{exp}}, \text{\AA}$	Состав $x$	$a^v, \text{\AA}$
EM1017	AlGaAs	0.08	5.6604(6)	0.510	5.6572
	GaAs (100)	0.08	5.6532(0)		5.6532
EM1540	AlGaAs	0.06	5.6532(6)	0	5.6532(6)
	GaAs (100)	0.06	5.6532(6)		5.6532
EM1555	AlGaAs	0.11	5.6461(2)	0.478	5.6492(8)
	GaAs (100)	0.07	5.6532(0)		5.6532
EM1585	AlGaAs	0.18	5.6321(4)	0.4384	5.6415(6)
	GaAs (100)	0.06	5.6532(0)		5.6532

Профили дифракции (600) эпитаксиальных гетероструктур EM1540, EM1555 и EM1585, приведенные на рис. 2, *b–d*, были разложены на составляющие  $K\alpha_{1,2}$ -дублеты аналогичным образом. У образца EM1540, который представляет собой гомоэпитаксиальную гетероструктуру GaAs/GaAs (100),  $K\alpha_{1,2}$ -дублет от пленки точно совпадает с дублетом от подложки. При этом полуширина общего профиля дифракции от гетероструктуры EM1540 остается неизменной по сравнению с монокристаллической пластиной GaAs (100), используемой в качестве подложки при росте структур, что свидетельствует о бездислокационном механизме такого типа роста и отличном сопряжении решеток пленки и подложки.

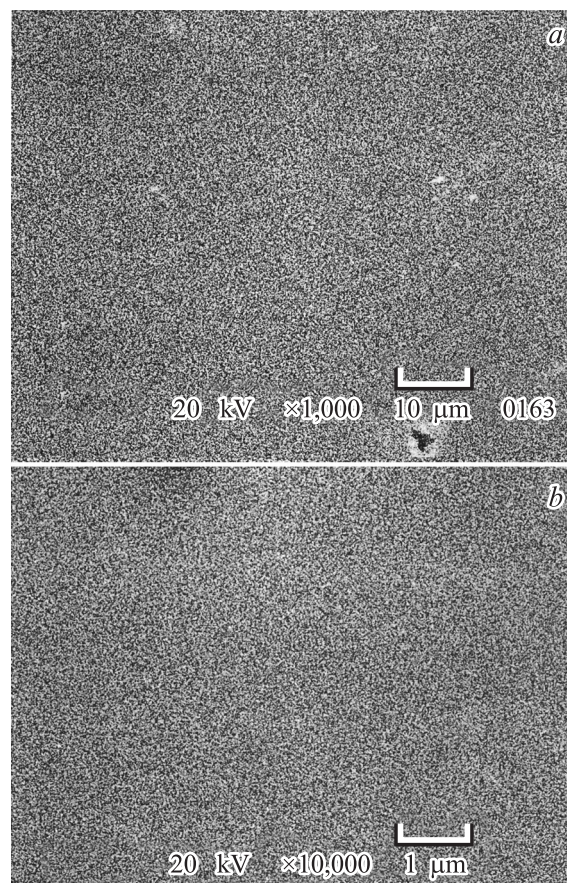
Как видно из графиков рис. 2, *c* и *d*, дифракция от образцов EM1555 и EM1585 также представляет собой наложение дублетов от подложки GaAs (100) и твердого раствора AlGaAs. Однако в отличие от гетероструктуры EM1017, выращенной по стандартной методике, расположение  $K\alpha_{1,2}$ -дублетов пленки и подложки у низкотемпературных гетероструктур существенно отличается.  $K\alpha_{1,2}$ -дублет от эпитаксиального твердого раствора AlGaAs расположен со стороны больших углов  $2\theta$  от дублета GaAs (100). Это является следствием того, что параметр кристаллической решетки AlGaAs меньше параметра GaAs (100).

Расчет параметров решетки с учетом внутренних напряжений для низкотемпературных эпитаксиальных гетероструктур был проведен нами с допущением того, что коэффициенты Пуассона для бинарных соединений GaAs и AlAs, полученных по новой методике, совпадают с коэффициентами, приведенными в [8–10]. Рассчитанные параметры приведены в табл. 1. Анализ полученных данных позволяет сделать заключение о том, что параметры решетки твердых растворов AlGaAs, полученных при пониженной температуре, не совпадают с параметрами решетки неупорядоченных твердых растворов таких же составов, исходя из закона Vegard, приводимого для системы AlAs–GaAs [7]. Однако стоит отметить, что с ростом концентрации атомов Al па-

раметр кристаллической решетки низкотемпературного эпитаксиального твердого раствора увеличивается.

#### Электронная микроскопия

Изучение морфологии поверхности гетероструктур, выращенных по новой технологии и при нормальных условиях с помощью электронного микроскопа, позволило получить информацию о качестве поверхности эпитаксиальных пленок. Кроме того, рентгеновский



**Рис. 3.** Изображение участков поверхности эпитаксиальных гетероструктур, полученное методом SEM: *a* — EM1017, *b* — EM1585.



микроанализ помог уточнить величины концентраций элементов в низкотемпературных твердых растворах, поскольку рентгеноструктурные исследования показали неожиданные результаты. Уточненные концентрации, приведенные в табл. 2, были использованы при расчетах параметров кристаллической решетки с учетом внутренних напряжений. Важно также отметить, что концентрация атомов галлия в приповерхностных слоях низкотемпературных пленок с учетом погрешности измерений немного превышает ту, которая должна быть у таких составов неупорядоченных твердых растворов. Что касается морфологии поверхности, то, как видно из рис. 3, *b*, низкотемпературный твердый раствор гетероструктуры EM1585 имеет практически гладкую поверхность в отличие от поверхности твердого раствора стандартного образца EM1017, на которой присутствуют небольшие дефекты (рис. 3, *a*).

#### ИК-спектры отражения

Принимая во внимание, что рост низкотемпературных эпитаксиальных твердых растворов AlGaAs с измененными параметрами кристаллической решетки по сравнению с неупорядоченными твердыми растворами неизбежно должен проявиться и в характере оптических спектров, в данной работе нами было предпринято исследование ИК-спектров отражения этих гетероструктур в области однофононного резонанса.

Благодаря глубокой проникающей способности ИК-излучения ИК-спектры отражения колебаний решетки позволяют получать сведения о реальном состоянии микроструктуры кристалла на значительной толщине, оценить тонкие решеточные свойства и внутренние напряжения в решетке, к которым данный метод является очень чувствительным. Эксперимент показывает, что в спектрах отражения неупорядоченных твердых растворов AlGaAs различных составов ( $0 < x < 1$ ) всегда присутствуют две основные моды колебаний, что соответствует критерию об оценке типа перестройки колебательного спектра, приведенному в работе [11], определяющему для твердого раствора AlGaAs двухмодовый тип перестройки колебательных спектров. Это основные колебания, к которым относят моду Al–As (с ростом концентрации Al в твердом растворе AlGaAs интенсивность этой моды увеличивается) и моду Ga–As (изменяющую свою интенсивность антиратно по отношению к моде Al–As, т.е. в соответствии с содержанием Ga в твердом растворе AlGaAs).

Экспериментальные данные также подтверждаются теоретическими расчетами TO и LO мод ИК-спектров отражения твердых растворов AlGaAs для различных  $x$ , выполненных в рамках модифицированной модели статистического изовалентного замещения в смешанных кристаллических системах (MREI-модели) [12] с задаваемым типом перестройки колебательного спектра вещества. Данные по LO и TO частотам колебаний, полученные в этой работе [12], хорошо согласуются с экспериментальными результатами работы [13]. Кроме того, работы [12,13] наглядно демонстрируют изменение

положения TO и LO мод колебаний в шкале частот с изменением концентрации Al в твердом растворе AlGaAs.

Моделирование ИК-спектров отражения эпитаксиальных гетероструктур было выполнено в модели полубесконечная подложка с диэлектрической функцией  $\epsilon_s$  и поверхностная тонкая пленка толщиной  $d$  с диэлектрической функцией  $\epsilon_f$ . В данной модели коэффициент отражения для нормального падения имеет вид [11]

$$R = \left| \frac{r_f(\omega) + r_{fs}(\omega) \cdot \exp(i2\beta)}{1 + r_f(\omega) \cdot r_{fs}(\omega) \cdot \exp(i2\beta)} \right|^2, \quad (4)$$

где

$$r_f(\omega) = \frac{1 - \sqrt{\epsilon_f(\omega)}}{1 + \sqrt{\epsilon_f(\omega)}}, \quad r_{fs} = \frac{\sqrt{\epsilon_f(\omega)} - \sqrt{\epsilon_s(\omega)}}{\sqrt{\epsilon_f(\omega)} + \sqrt{\epsilon_s(\omega)}},$$

$$\beta = \frac{2\pi d \sqrt{\epsilon_f(\omega)}}{\lambda}, \quad (5)$$

$\lambda = 10\,000/\omega$  — длина волны.

Диэлектрическая функция пленки задавалась с учетом адиабатического приближения:

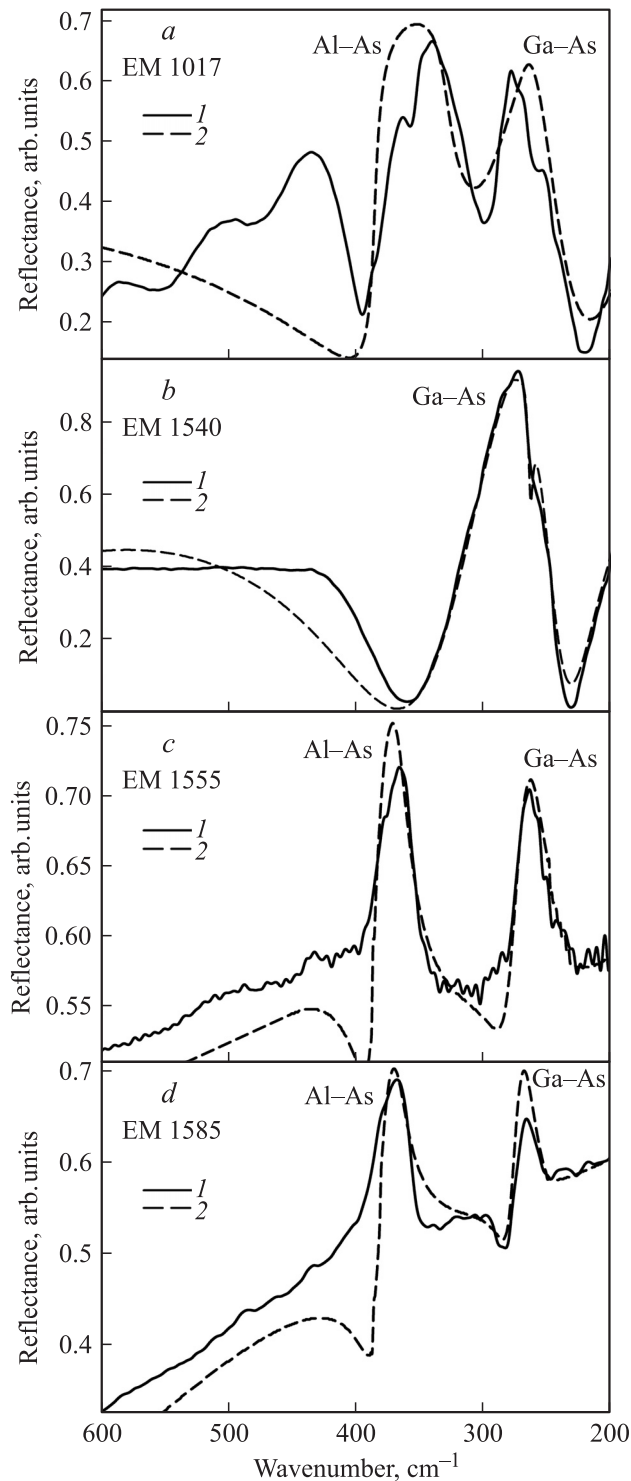
$$\epsilon_f(\omega) = \epsilon_\infty + \sum_i \frac{4\pi f_i (\omega_{TOi})^2}{(\omega_{TOi})^2 - \omega^2 + i\omega\gamma_i}, \quad (6)$$

где  $f_i$ ,  $\omega_i$ ,  $\gamma_i$  — сила, резонансная частота и затухание  $i$ -го осциллятора.

Так, на рис. 4, *a* приведены экспериментальный и расчетный ИК-спектры отражения от эпитаксиальной гетероструктуры AlGaAs/GaAs (100) с  $x \approx 0.50$  (образец EM1017). Как видно из рисунка, в спектре присутствуют две основные моды колебаний, частоты TO и LO мод которых совпадают с приведенными в работах [12,13]. Рост отражательной способности в области  $400\text{--}500\text{ см}^{-1}$  обусловлен возникновением плазменных колебаний, возникающих вследствие легирования подложки GaAs (100).

ИК-спектр отражения гомоэпитаксиальной низкотемпературной гетероструктуры EM1540 приведен на рис. 4, *b*. Как видно из эпитаксиальных и расчетных данных, в спектре присутствует одна фононная мода, расположенная в области  $250\text{--}350\text{ см}^{-1}$ . Возникновение плазмон-фононного резонанса в полосе  $300\text{--}350\text{ см}^{-1}$  так же, как и в случае с образцом EM1017, накладывает отпечаток на вид спектра отражения.

Спектры низкотемпературных эпитаксиальных гетероструктур образцов EM1555 и EM1585 (рис. 4, *c-d*) так же, как и спектр образца EM1017, содержат две основные фононные моды Al–As и Ga–As. Однако, как показал дисперсионный анализ, во-первых, основные моды этих колебаний не совпадают ни по частотам, ни по интенсивностям TO и LO фононов (которые необычно малы) с модами неупорядоченных твердых растворов аналогичных составов [12,13]. Кроме того, зависимость изменения частоты продольных и поперечных



**Рис. 4.** ИК-спектры отражения гетероструктур AlGaAs/GaAs(100): *a* — EM1017, *b* — EM1540, *c* — EM1555, *d* — EM1585. Линии на рисунках: 1 — эксперимент, 2 — модель.

мод основных колебаний с изменением концентрации атомов в металлической подрешетке не удовлетворяет тем же выявленным зависимостям [12,13]. Во-вторых, моделирование показало, что для низкотемператур-

ных пленок высокочастотная диэлектрическая проницаемость  $\epsilon_\infty$  имеет необычно высокое значение и примерно в 2 раза превышает высокочастотную диэлектрическую проницаемость  $\epsilon_\infty$  для твердого раствора стандартной гетероструктуры. Также необходимо отметить и необычный плавный спад отражательной способности в дальней ИК-области у низкотемпературных эпитаксиальных гетероструктур, характерный, скорее, для металлов, а не для полупроводников, причем существенные различия экспериментальных и рассчитанных в модели пленка-подложка спектров низкотемпературных гетероструктур наблюдаются в области спада интенсивности отражения.

#### 4. Заключение

Анализируя данные, полученные методами рентгеновской дифракции, растровой электронной микроскопии и ИК-спектроскопии, можно сделать несколько важных выводов о структуре твердых растворов AlGaAs, выращенных по новой технологии.

Эпитаксиальные пленки низкотемпературных твердых растворов AlGaAs, как и неупорядоченные твердые растворы, имеют структуру сфалерита, что достаточно хорошо прослеживается в случае роста гомоэпитаксиальной структуры GaAs/GaAs(100), поскольку из результатов рентгеновской дифракции следует, что кристаллические решетки твердого раствора и подложки прекрасно согласованы.

Однако существенным отличием является то, что параметр кристаллической решетки у эпитаксиальной пленки, выращенной при пониженной температуре, хоть и увеличивается с ростом концентрации атомов Al в металлической подрешетке, но по своей величине он меньше, чем у GaAs, что противоречит общеизвестному закону Вегарда [7]. Эти данные, полученные вначале из анализа результатов рентгеновской дифракции, подтверждаются и методом ИК-спектроскопии, исходя из данных о частотах и интенсивностях ТО и LO фононов основных мод. Стоит так же отметить, что состав низкотемпературных твердых растворов, рассчитанный исходя из данных, определенных по слоям, растущим при нормальных условиях (температура роста 600–700°C, соотношение элементов V и III групп составляет  $\sim 100$ –200), не совпадает с определенным методом рентгеновского микроанализа.

Исследования структурного качества пленок AlGaAs, аналогичные представленным в нашей статье, были проведены в [14,15], где образцы на основе твердых растворов AlGaAs были получены методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) при низких температурах ( $\sim 250^\circ\text{C}$ ). Однако, как было показано в этих работах [14,15], при низкотемпературной МЛЭ в пленках наблюдался избыток атомов мышьяка, который мог образовывать упорядоченно расположенные в толще пленки кластеры, вследствие чего параметр кристаллической решетки низкотемпературных AlGaAs

был больше, чем у нормальных твердых растворов. Последующий отжиг пленок перераспределял избыточный мышьяк и приводил к уменьшению параметров решетки до „нормальных“ для данных концентраций величин.

А вот чтобы объяснить, что рост МОС-гидридных твердых растворов AlGaAs, полученных нами при пониженной температуре и минимальном соотношении элементов V и III групп, сопровождается уменьшением параметра кристаллической решетки, нам приходится допустить, что атомы галлия в металлической подрешетке не замещаются атомами алюминия, а освобожденные места остаются вакантными. Однако для этого вакансии должны образовываться лишь в центрах граней сфалеритной решетки, так как только при таком условии параметр кристаллической решетки твердого раствора может быть меньше параметра GaAs. В пользу данного предположения свидетельствуют несколько установленных фактов. Во-первых, как было показано методом рентгеновского микроанализа, в приповерхностных слоях низкотемпературных пленок наблюдается небольшой избыток атомов галлия, видимо, ушедших из металлической подрешетки, но не замещенных алюминием. Вследствие этого изменился характер ИК-отражения от таких пленок в сравнении со спектрами от неупорядоченных твердых растворов, что подтверждают и расчеты в модели пленка–подложка. А во-вторых, анализируя результаты рентгеновской дифракции, можно отметить, что полуширины дифракционных линий (600) от низкотемпературных твердых растворов заметно больше, чем для твердого раствора, выращенного по стандартной технологии. А как известно, изменение полуширин дифракционных линий в большую сторону может свидетельствовать о дефектности структуры, т.е. об образовании вакансий в кристаллической решетке.

Таким образом, на основании полученных результатов можно утверждать, что термодинамические условия эпитаксиального роста при пониженной температуре и минимальном соотношении элементов V и III групп приводят к тому, что при концентрациях атомов алюминия  $0 < x < 1$  происходит образование твердого раствора вычитания AlGaAs.

Но если образование химического соединения AlGaAs<sub>2</sub> с параметром, меньшим, чем у GaAs при возникновении сверхструктурных фаз [1–3], было обусловлено кинетическими превращениями твердого раствора, а именно разделением его на фазы под воздействием внутренних напряжений кристаллической решетки, что привело к словесному упорядочению расположения атомов Al и Ga в подрешетке A<sup>III</sup> и к тетрагональному сжатию в направлении оси роста кристаллической решетки, то при эпитаксиальном росте при низкотемпературной технологии возникновение перестройки структуры с образованием твердых растворов вычитания вызвано термодинамическим типом неустойчивости относительно спонтанного разделения на фазы, а упругая энергия, приводящая этот механизм в действие, возникает, скорее

всего, вследствие требования когерентного (бездислокационного) сопряжения разделяющихся фаз.

Авторы работы предполагают продолжение исследований такого типа гетероструктур, в частности остается открытым вопрос о параметрах запрещенной зоны этих образцов.

Авторский коллектив благодарит сотрудников кафедры Физики твердого тела и наноструктур Е.И. Завалишина и А.Н. Лукина за ценные советы при обсуждении результатов.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований.

## Список литературы

- [1] Э.П. Домашевская, Н.Н. Гордиенко, Н.А. Румянцова, П.В. Середин, Б.Л. Агапов, Л.А. Битюцкая, И.Н. Арсентьев, Л.С. Вавилова, И.С. Тарасов. ФТП, **42**, 9 (2008).
- [2] Э.П. Домашевская, П.В. Середин, Э.А. Долгополова, И.Е. Занин, И.Н. Арсентьев, Д.А. Винокуров, А.Л. Станкевич, И.С. Тарасов. ФТП, **39**, 3 (2005).
- [3] E.P. Domashevskaya, P.V. Seredin, A.N. Lukin, L.A. Bityutskaya, M.V. Grechkina, I.N. Arsent'ev, D.A. Vinokurov, I.S. Tarasov. Surf. Interf. Analysis., **8** (4), 828 (2006).
- [4] A. Zunger. MRS-IRS Bulletin/July 1997; <http://www.sst.nrel.gov/images/mrs97>
- [5] W.B.Pearson. *Crystal Chemistry and Physics of Metals and Alloys* (Wiley; N.Y., 1972).
- [6] В.С. Земсков. *Твердые растворы в полупроводниковых системах*. Справочник (М., Наука, 1978).
- [7] Yu.A. Goldberg. In: *Handbook Series on Semiconductor Parameters*, ed. by M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur (World Sci., London, 1999) v. 2. p. 1
- [8] D. Zhou, B.F. Usher. J. Phys. D: Appl. Phys., **34**, 1461 (2001).
- [9] Z.R. Wasilewski, M.M. Dion, D.J. Lockwood, P. Poole, R.W. Streater, A.J. Spring Thorpe. J. Appl. Phys., **81**, 1683 (1997).
- [10] S. Adachi. J. Appl. Phys., **58**, R1 (1985).
- [11] Л.К. Водопьянов, С.П. Козырев, Ю.Г. Садофьев. ФТТ, **41** (6), 982 (1999).
- [12] I.F. Chang, S.S. Mitra. Phys. Rev. B, **2** (4), 1215 (1970).
- [13] M. Ilegems, G.L. Pearson. Phys. Rev. B. **1** (4), 1576 (1970).
- [14] S. Fleisher, C.D. Beling, S. Fung, W.R. Nieveen, J.E. Squire, J.Q. Zheng, M. Missous. J. Appl. Phys., **81** (1), 190 (1997).
- [15] А.В. Бойцов, Н.А. Берт, В.В. Чалдышев, В.В. Преображенский, М.А. Путьято, Б.Р. Семягин. ФТП, **43** (2), 278 (2009).

Редактор Л.В. Беляков

**Structure and optical properties  
of low-temperature MOCVD  
heterostructures AlGaAs/GaAs (100) on  
the basis of subtraction solid solution**

*P.V. Seredin, A.V. Glotov, E.P. Domashevskaya,  
I.N. Arsentyev\*, D.A. Vinokurov\*, A.L. Stankevich\*,  
I.S. Tarasov\**

Voronezh State University,  
394006 Voronezh, Russia  
\* Ioffe Physicotechnical Institute,  
Russia Academy of Sciences,  
194021 St. Petersburg, Russia

**Abstract** Using methods of the X-ray diffraction, scanning electronic microscopy and IR-reflection spectroscopy the properties of epitaxial low temperature MOCVD AlGaAs/GaAs (100) heterostructures were studied. It is established, that change of lattice parameter of AlGaAs solid solutions depending on concentration of Al does not submit to classical Vegards law, and has less value than such a parameter of GaAs.