

# Влияние кремния на релаксацию кристаллической решетки в гетероструктурах $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$ , полученных МОС-гидридным методом

© П.В. Середин<sup>¶</sup>, А.В. Глотов, В.Е. Терновая, 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 14 октября 2010 г. Принята к печати 22 октября 2010 г.)

Представлены данные рентгеновской дифракции и инфракрасной спектроскопии для полученных МОС-гидридным методом гетероструктур  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$  и гомоэпитаксиальных структур  $\text{GaAs}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$ , легированных кремнием до  $\sim 1$  ат%. Показано, что образование твердых растворов с кремнием в гомоэпитаксиальных структурах приводит к уменьшению параметра кристаллической решетки эпитаксиального слоя и отрицательной величине рассогласования с параметром монокристаллической подложки,  $\Delta a < 0$ . В то же время образование четверных твердых растворов в гетероструктурах  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$  не приводит к существенным напряжениям кристаллической решетки. Введением кремния в эпитаксиальные слои этих гетероструктур можно добиться полного согласования параметров кристаллических решеток пленки и подложки при соответствующем подборе технологических условий роста эпитаксиальных слоев.

## 1. Введение

В последние годы усилия технологов, исследователей и теоретиков сконцентрированы на изучении физических свойств полупроводниковых твердых растворов  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , поскольку тонкие пленки на их основе являются базисом для большинства оптоэлектронных компонентов, гетеролазеров, а также элементов эффективных солнечных фотопреобразователей. Разработка любого из вышеперечисленных устройств требует от полупроводникового эпитаксиального материала определенных и стабильных электрических и оптических свойств. Существенно изменять такие свойства можно посредством введения небольшого количества примесей и дефектов. Однако если один тип дефектов может оказаться полезным, то другой может сделать будущий прибор некачественным.

Легирующие примеси управляют типом проводимости и электросопротивлением, образуя „мелкие“ донорные и акцепторные уровни. Их энергия ионизации очень мала по сравнению с шириной запрещенной зоны данного полупроводника. В то же время существуют в большом количестве дефекты, называемые „глубокими“ центрами, уровни которых могут лежать вблизи середины запрещенной зоны.

Глубокие уровни обычно образуют атомы примеси, расположенные в Периодической таблице вдали от атомов основной решетки. Межузельные примеси и комплексы также могут образовывать глубокие центры. Глубокие центры используются для примесного фотовозбуждения в фотопроводниках и в инфракрасных детекторах [1].

Известно, что примесный атом кремния в узле галлия  $\text{GaAs}$  является „мелким“ водородоподобным донором. Влияние  $\text{Si}$  на параметр кристаллической решетки и ширину запрещенной зоны объемного  $\text{GaAs}$  было исследовано для концентраций  $\text{Si}$  до 5 ат% [2], и было показано, что пределом растворимости кремния является величина 0,6 ат%. В других работах для кристаллических пленок  $(\text{GaAs})_{1-x}\text{Si}_x$ , изготовленных методом напыления в атмосфере силана  $\text{SiH}_4$ , установлено, что параметр кристаллической решетки линейно зависит от содержания кремния в широких пределах, от 0 до 55 ат% [3].

Кроме того, кремний может встраиваться в твердые растворы  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , содержащие > 25%  $\text{Al}$  [4], или в чистый  $\text{GaAs}$ , подвергнутый давлению [5], в виде глубокого донора, называемого  $D_X$ -центром, который обладает совершенно другими свойствами, чем мелкий донор.

В ряде теоретических работ показано, что структуры с  $D_X$ -центрами существуют при очень большой, зависящей от легирования, релаксации решетки, возникающей при разрыве связей донор-кристалл. Это структурное изменение включает донорную примесь IV группы (тот же  $\text{Si}$ ), движущуюся из замещенного узла  $\text{Ga}$  в почти межузельное состояние. Такое положение атома в решетке  $\text{GaAs}$  или  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  должно меньше сказываться на ее параметре. Однако такая конфигурация должна быть стабилизирована по отношению к соседям только за счет захвата лишнего электрона, и ее зарядовое состояние однократно отрицательно и может быть образовано согласно реакции:  $2d^0 \rightarrow d^+ + D_X$  ( $d^0$  — нейтральный донор).

Обнаружено, что в твердых растворах  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  неустойчивость между состояниями мелких и глубоких уровней приводит к преобразованию мелких доноров

<sup>¶</sup> E-mail: paul@phys.vsu.ru

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

Таблица 1. Состав и параметры исследованных гетероструктур

Образец	$x$	Температура роста $T$ , °C	Поток $\text{Si}_2\text{H}_6$ $V$ , $\text{см}^3/\text{мин}$	Холловская концентрация, $\text{см}^{-3}$	Толщина пленки, $\mu\text{м}$
EM2010	0	700	400	$7.7 \cdot 10^{17}$	1.7
EM2011	0	650	400	$2.7 \cdot 10^{17}$	1.7
EM2012	0	650	100	$6.3 \cdot 10^{17}$	1.7
EM2013	0	750	100	$3.9 \cdot 10^{18}$	1.7
EM2014	0	750	400	$2.5 \cdot 10^{18}$	1.7
EM2015	0.25	750	400	$3.3 \cdot 10^{17}$	2.0
EM2016	0.25	750	100	$4.2 \cdot 10^{17}$	2.0
EM2017	0.25	700	100	$9.9 \cdot 10^{16}$	2.0
EM2018	0.25	700	400	$3.1 \cdot 10^{16}$	2.0
EM2019	0.25	650	400	$1.9 \cdot 10^{16}$	2.0
EM2021	0.40	650	100	$3.7 \cdot 10^{16}$	2.0
EM2022	0.40	650	400	$1.5 \cdot 10^{16}$	2.0
EM2023	0.40	700	400	$2.9 \cdot 10^{16}$	2.0
EM2024	0.40	700	100	$7.8 \cdot 10^{16}$	2.0
EM2025	0.40	750	100	$2.0 \cdot 10^{17}$	2.0
EM2026	0.40	750	400	$1.3 \cdot 10^{17}$	2.0

в  $DX$ -центры [6,7]. Выигрыш в энергии при образовании  $DX$ -центров из-за смещений в решетке происходит из-за их особого свойства — отрицательной энергии Хаббарда  $U$ . Для глубокого центра с отрицательной  $U$  второй электрон притягивается к центру, хотя тот уже занят одним электроном. Таким образом, оказывается, что конечное отрицательно заряженное состояние более стабильно, чем нейтральное, и это делает еще более выгодным превращение дефекта в глубокий центр в результате релаксации решетки.

Авторы работы [8] на основании расчетов методом молекулярных орбиталей определили полную энергию и локальную деформацию вокруг мелких ионизованных доноров в соединениях III–V. Это позволило рассчитать частоты оптических колебаний, когда атом Al в  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}$  (для  $x < 0.04$ ) занимает положение следующего ближайшего соседа Ga относительно  $\text{Si}_{\text{Ga}}$ . В связи с этим становится понятной необходимость использования инфракрасной колебательной фурье-спектроскопии высокого разрешения для изучения тонких решеточных свойств и оценки структурного качества легированных кремнием эпитаксиальных пленок.

Тем не менее вопросы влияния микроскопических конфигураций релаксированного состояния на согласование параметров решеток в гетеропаре при высоком уровне легирования исходного эпитаксиального материала по-прежнему являются актуальными в технологии гетероструктур.

Ранее мы уже наблюдали влияние высокого уровня автолегирования акцепторной примесью на структурные и оптические свойства низкотемпературных эпитаксиальных гетероструктур  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{C}$  [9]. Цель данной работы — исследование влияния высокого уровня легирования кремнием на релаксацию параметров кристаллической решетки эпитаксиальных слоев твердых

растворов  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}$  и  $\text{GaAs}:\text{Si}$  и их согласование с параметрами подложки.

## 2. Объекты и методы исследования

Исследуемые образцы, представляющие собой высоколегированные эпитаксиальные структуры  $\text{GaAs}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$  и  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$ , выращивались для создания туннельного перехода на установке МОС-гидридной эпитаксии (газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений) „EMCORE GS 3/100“ в вертикальном реакторе с высокой скоростью вращения подложкодержателя. Температура подложкодержателя варьировалась в пределах 650–750°C, давление в реакторе составляло 77 Торр, скорость вращения подложкодержателя 1000 об/мин. В качестве исходных реагентов использовались триметилгаллий  $\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$ , триметилалюминий  $\text{Al}(\text{CH}_3)_3$  и арсин  $\text{AsH}_3$ . Источником легирующего элемента кремния служил дисилан  $\text{Si}_2\text{H}_6$ . Толщина и состав выращиваемых слоев, а также значения потока дисилана для исследуемых образцов приведены в табл. 1.

Определение параметров решетки и структурного качества эпитаксиальных структур проводили с использованием рентгеновской дифракции на дифрактометрах ARL X'TRA Thermo Techno с высоким угловым разрешением на  $\text{CuK}\alpha_{1,2}$ -излучении и ДРОН 4-07 на  $\text{CoK}\alpha_{1,2}$ -излучении.

Для определения возможных тетрагональных искажений кубической решетки и несогласования параметров эпитаксиального слоя  $\text{GaAs}:\text{Si}$  и подложки  $\text{GaAs}(100)$  при высоких уровнях легирования кремнием была выбрана дифракционная линия (600), которую получали для структур  $\text{GaAs}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$  с использованием из-

лучения кобальта. Выбор  $\text{CoK}\alpha$ -излучения для исследований обусловлен тем обстоятельством, что эпитаксиальная пленка GaAs, даже легированная кремнием в довольно высоких концентрациях, может быть достаточно хорошо согласована по параметру кристаллической решетки с подложкой GaAs(100). Наивысшая точность в определении параметра достигается при использовании дальних дифракционных линий на больших углах отражения. Для  $\text{K}\alpha$ -излучения меди дифракция (600) лежит в интервале углов  $109\text{--}111^\circ$ , а для  $\text{K}\alpha$ -излучения кобальта в пределах  $142\text{--}145^\circ$ . Следовательно, на таких углах даже малая дисторсия кристаллической решетки в гомоэпитаксиальных структурах может быть обнаружена по сдвигу  $\text{K}\alpha_{1,2}$ -дублета от пленки относительно дублета от подложки. Это позволяет повысить точность определения межплоскостных расстояний и параметров решетки до  $\sim 0.0001 \text{ \AA}$ .

Дополнительную информацию о реальном строении сложных гетероструктур на значительной толщине мы получили методом инфракрасной (ИК) оптической колебательной спектроскопии, которая позволяет судить не только о молекулярном составе вещества, но и о внутренних напряжениях в решетке, к которым данный метод является очень чувствительным [10].

Инфракрасные спектры отражения были получены с использованием ИК фурье-спектрометра Vertex-70 Bruker.

Морфологию поверхности исследовали на растровом электронном микроскопе JOEL, концентрации элементов в эпитаксиальных слоях были уточнены методом рентгеновского микроанализа с использованием приставки Oxford Instruments. Холловские измерения концентрации носителей проводились шестизондовым методом по стандартной методике при температуре жидкого азота (табл. 1).

### 3. Результаты исследований и обсуждение

Результаты рентгеновского микроанализа показали, что содержание внедренного в кристаллическую решетку кремния может достигать 1 ат%, что достаточно для образования твердых растворов в эпитаксиальных слоях. В то же время данные холловских измерений концентрации свободных электронов при температуре жидкого азота дают величины  $10^{17}\text{--}10^{18} \text{ см}^{-3}$ , характерные для обычного легирования. Большинство экспериментов с DX-центрами показывали, что их концентрация почти равна концентрации легирующих доноров,  $\sim 10^{17} \text{ см}^{-3}$ , однако все эти изменения были выполнены при малых концентрациях легирующего элемента Si, что отличается от концентраций, которые удалось достичь в нашем эксперименте.

Морфологические исследования поверхности эпитаксиальных структур GaAs:Si/GaAs(100) и гетероструктур с твердыми растворами  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}$  указывают на монотонно гладкий рельеф поверхности всех образцов, что

свидетельствует о преобладании послойного механизма наращивания твердых растворов.

Для определения изменений, происходящих в кристаллической решетке гомоэпитаксиальных пленок GaAs:Si и эпитаксиальных твердых растворах  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}$  с высокой концентрацией легирующего элемента кремния и при различных концентрациях алюминия в металлической подрешетке, необходимо наиболее точно определить параметры кристаллических решеток твердых растворов.

Постоянная решетки  $a^v$  с учетом упругих напряжений в гетероэпитаксиальном слое в соответствии с линейной теорией упругости может быть рассчитана как [11,12]

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

где  $\nu$  — коэффициенты Пуассона для эпитаксиальных слоев,  $a^\perp$  и  $a^\parallel$  — параметры решетки эпитаксиального слоя перпендикулярно и параллельно плоскости роста слоя.

Ввиду слабого рассогласования параметров решетки монокристаллической подложкой GaAs и пленки  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  параметр эпитаксиального слоя  $a^\parallel$  может быть заменен параметром кристаллической решетки GaAs:  $a^\parallel = a_{\text{GaAs}} = 5.6532 \text{ \AA}$ .

Таким образом, соотношение (1) для параметра решетки эпитаксиального слоя  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  с учетом линейной зависимости для коэффициента Пуассона твердого раствора

$$\nu_{\text{AlGaAs}} = x\nu_{\text{AlAs}} + (1-x)\nu_{\text{GaAs}},$$

где  $\nu_{\text{AlAs}}$ ,  $\nu_{\text{GaAs}}$  — коэффициенты Пуассона AlAs и GaAs, может быть записано как

$$a_{\text{AlGaAs}}^v = a_{\text{AlGaAs}}^\perp \frac{1 - [x\nu_{\text{AlAs}} + (1-x)\nu_{\text{GaAs}}]}{1 + [x\nu_{\text{AlAs}} + (1-x)\nu_{\text{GaAs}}]} + a_{\text{GaAs}}^v \frac{2[x\nu_{\text{AlAs}} + (1-x)\nu_{\text{GaAs}}]}{1 + [x\nu_{\text{AlAs}} + (1-x)\nu_{\text{GaAs}}]}. \quad (2)$$

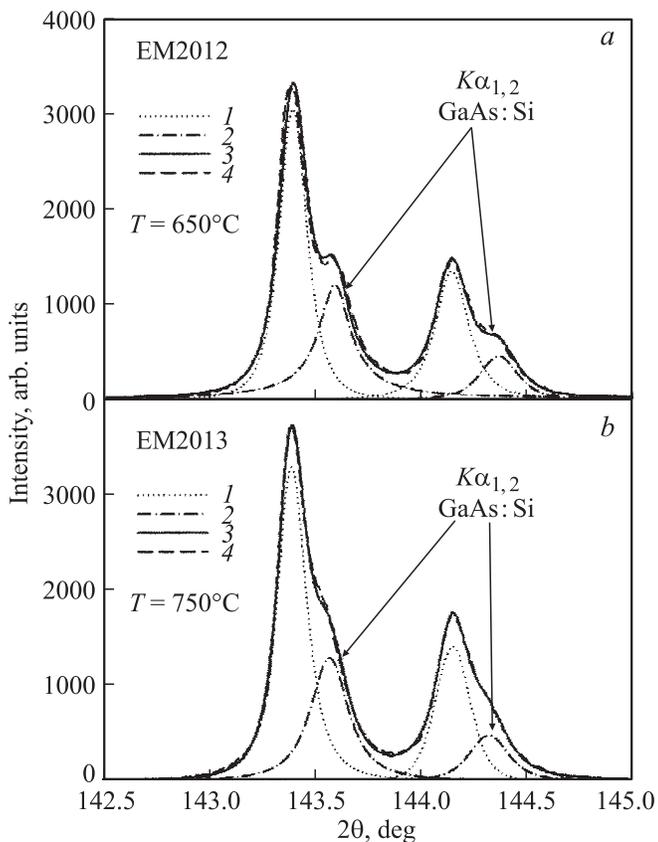
Расчеты параметров кристаллической решетки эпитаксиальных пленок GaAs:Si и  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}$  с учетом внутренних напряжений проводились на основании полученных экспериментальных данных. Допущением при расчетах служит тот факт, что используемые для вычислений коэффициенты Пуассона AlAs:Si, GaAs:Si были приняты равными коэффициентам бинарных соединений AlAs и GaAs и взяты из литературных данных:  $\nu_{\text{AlAs}} = 0.255$  [13],  $\nu_{\text{GaAs}} = 0.312$  [14].

#### 3.1. Образование твердых растворов в гомоэпитаксиальных структурах GaAs:Si/GaAs(100)

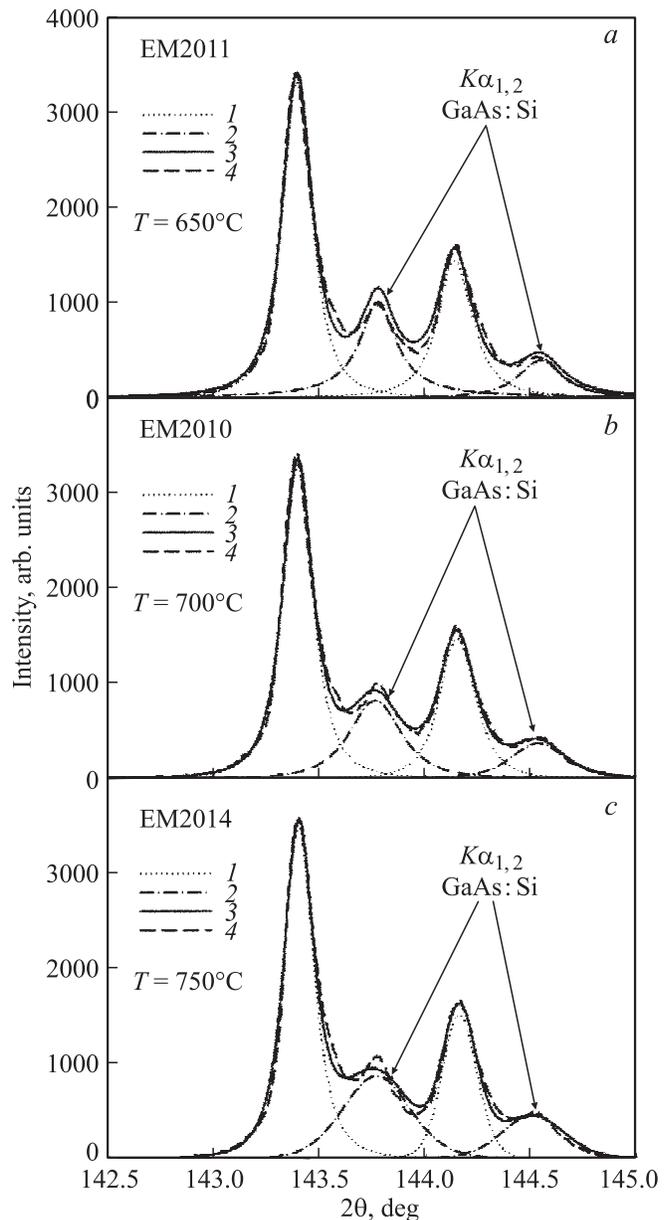
На рис. 1,  $a, b$  и 2,  $a-c$  приведены профили рентгеновской дифракции от эпитаксиальных структур GaAs:Si/GaAs(100), выращенных при различных потоках дисилана: 100 и  $400 \text{ см}^3/\text{мин}$ .

Как видно из экспериментальных данных, дифракция от плоскости (600) представляет собой наложение двух  $K\alpha_{1,2}$ -дублетов: первый, малоинтенсивный, со стороны больших углов — от пленки GaAs:Si, второй — от монокристаллической подложки GaAs(100). Разложение дифракционных профилей на составляющие проводили с помощью программного пакета SigmaPlot 11, 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), учитывая, что в силу своей малой толщины ( $\sim 2$  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 эпитаксиальной пленки GaAs:Si. На основании полученных данных была определена ширина на половине высоты дифракционных  $K\alpha_{1,2}$ -дублетов  $\Delta\theta$  и с помощью соотношений (1), (2) рассчитаны параметры решеток с учетом внутренних напряжений (табл. 2).

Полученные экспериментальные данные показывают, что все пленки GaAs, легированные кремнием, имеют



**Рис. 1.** Профили дифракционных линий (600) от гомоэпитаксиальных структур GaAs:Si/GaAs(100), выращенных при потоке дисилана  $100 \text{ см}^3/\text{мин}$ . Образцы: *a* — EM2012, *b* — EM2013. 1 — подложка GaAs(100), 2 — твердый раствор GaAs:Si; 3 — модель, 4 — эксперимент.



**Рис. 2.** Профили дифракционных линий (600) от гомоэпитаксиальных структур GaAs:Si/GaAs(100), выращенных при потоке дисилана  $400 \text{ см}^3/\text{мин}$ . Образцы: *a* — EM2011, *b* — EM2010, *c* — EM2014. 1 — подложка GaAs(100), 2 — твердый раствор GaAs:Si; 3 — модель, 4 — эксперимент.

параметр решетки меньше, чем параметр подложки  $a = 5.6532 \text{ \AA}$ , вследствие чего  $K\alpha_{1,2}$ -дублет от плоскости (600) во всех легированных гомоэпитаксиальных структурах сдвинут в сторону больших углов относительно  $K\alpha_{1,2}$ -дублета подложки. Наибольшие отклонения параметра в меньшую сторону, на  $\Delta a = 0.0034 \text{ \AA}$ , оказываются для пленок, полученных при больших потоках,  $400 \text{ см}^3/\text{мин}$ , в независимости от изменения температуры подложки в пределах  $650\text{--}750^\circ\text{C}$ . При этом величина концентрации основных носителей (электронов) изменяется в пределах одного порядка,  $\sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ,

**Таблица 2.** Данные рентгеноструктурного анализа и рентгеновского микроанализа для гомоэпитаксиальных структур

Образец	$n_{\text{Ga}}$ , at%	$n_{\text{As}}$ , at%	$n_{\text{Si}}$ , at%	Ширина $\Delta\theta$ , град	Параметр решетки, Å	Рассогласование $\Delta a$ , Å	
						эксперимент	расчет
GaAs	50.0	50.0	—	0.16	5.6532		
EM2010	50.1	49.3	0.5	0.29	5.6498	-0.0034	-0.0011
EM2011	49.4	49.6	1.0	0.25	5.6498	-0.0035	-0.0022
EM2012	49.8	49.7	0.5	0.21	5.6513	-0.0019	-0.0011
EM2013	50.0	49.5	0.4	0.21	5.6515	-0.0018	-0.0010
EM2014	50.2	49.2	0.5	0.36	5.6498	-0.0034	-0.0011

Примечание.  $n_{\text{Ga}}$ ,  $n_{\text{As}}$ ,  $n_{\text{Si}}$  — концентрации элементов Ga, As, Si.

указывая на то, что большая часть атомов кремния не только внедрилась в обе подрешетки, замещая как галлий, так и мышьяк, но и образовала более сложные дефекты. Это обстоятельство приводит к значительному уменьшению параметра эпитаксиальной пленки ввиду существенно меньших размеров атома кремния ( $R_{\text{Si}} = 1.176 \text{ \AA}$ ) по отношению к почти одинаковым по размеру атомам Ga и As ( $R_{\text{Ga}} = 1.221 \text{ \AA}$ ,  $R_{\text{As}} = 1.245 \text{ \AA}$ ).

Заметное рассогласование параметра кристаллической решетки сильно легированной кремнием пленки GaAs:Si с параметром монокристаллической подложки приводит к заметному уширению  $K\alpha_{1,2}$ -дублета пленки относительно дублета подложки GaAs, что обусловлено образованием тройного твердого раствора GaAs–Si, в котором атомы кремния распределяются в подрешетках Ga и As. Наибольшее уширение дифракционных линий наблюдается в твердом растворе образца EM2014, полученном при высоком потоке дисилана ( $400 \text{ см}^3/\text{мин}$ ) и наибольшей температуре подложки ( $750^\circ\text{C}$ ). Это может быть обусловлено расслоением эпитаксиальной пленки по составу, т. е. композиционным распадом.

Линейный закон Вегарда для системы GaAs–Si в общем виде может быть записан следующим образом:

$$a(y) = 5.6532 - 0.2222y, \quad (3)$$

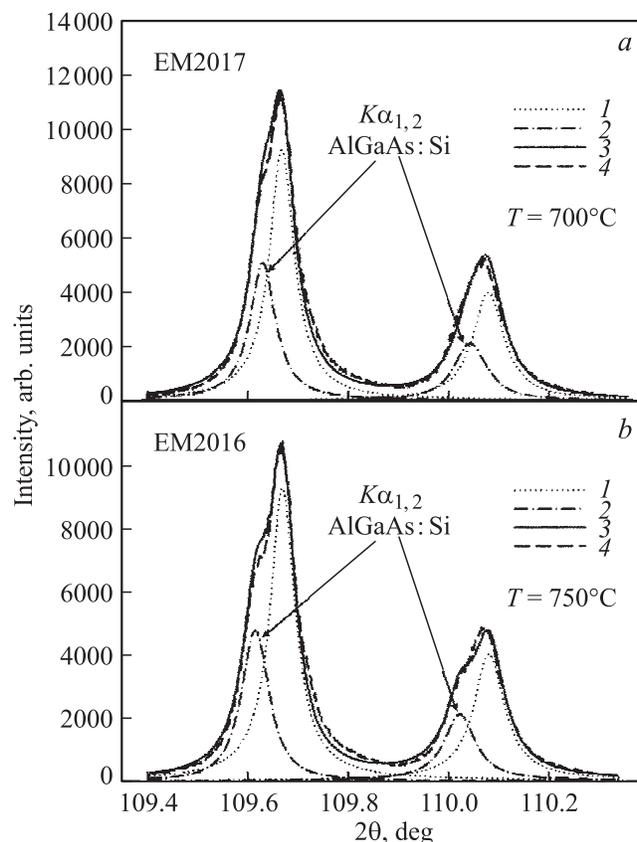
где  $y$  — концентрация атомов кремния в твердом растворе.

В табл. 2 приведены рассчитанные с учетом (3) величины рассогласования параметров решеток  $\Delta a$  для пленок GaAs:Si, которые существенно отличаются от экспериментальных  $\Delta a$  для соответствующих концентраций кремния. Это еще раз свидетельствует о том, что атомы Si не только замещают атомы в узлах кристаллической решетки, но и образуют более сложные дефекты и комплексы.

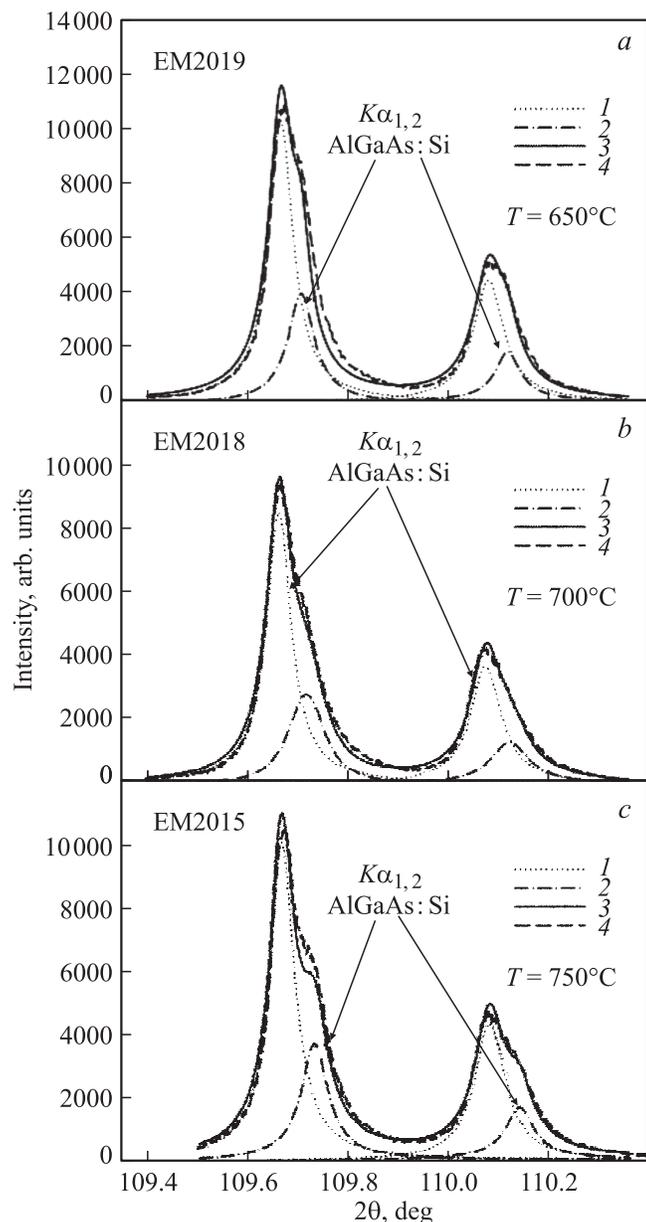
Следует также отметить, что по данным микроанализа практически во всех гомоэпитаксиальных структурах концентрация атомов галлия в пленке превышает концентрацию атомов мышьяка с учетом количества легирующей примеси — кремния (табл. 2). Этот факт способствует образованию в эпитаксиальном слое GaAs:Si антиструктурных дефектов типа Ga<sub>As</sub>.

### 3.2. Образование четверных твердых растворов в гетероструктурах AlGaAs:Si/GaAs(100)

Влияние высокого уровня легирования кремнием на согласование решеток в гетероструктурах Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As:Si/GaAs(100) изучали по дифракционным линиям (600), которые получали с использованием излучения меди. Профили линий (600) от эпитаксиальных



**Рис. 3.** Профили дифракционных линий (600) от эпитаксиальных гетероструктур Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As:Si/GaAs(100) с  $x \approx 0.25$ , выращенных при потоке дисилана  $100 \text{ см}^3/\text{мин}$ . Образцы: *a* — EM2017, *b* — EM2016. 1 — подложка GaAs(100), 2 — твердый раствор Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, 3 — модель, 4 — эксперимент.



**Рис. 4.** Профили дифракционных линий (600) от эпитаксиальных гетероструктур  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$  с  $x \approx 0.25$ , выращенных при потоке дисилана  $400 \text{ см}^3/\text{мин}$ . Образцы: *a* — EM2019, *b* — EM2018, *c* — EM2015. 1 — подложка GaAs(100), 2 — твердый раствор  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , 3 — модель, 4 — эксперимент.

гетероструктур  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$  с содержанием алюминия в металлической подрешетке, близким к 0.25, приведены на рис. 3, *a, b* и 4, *a–c*, с содержанием алюминия в металлической подрешетке, близким к 0.40, на рис. 5, *a–c* и 6, *a–c* для двух потоков дисилана 100 и  $400 \text{ см}^3/\text{мин}$ .

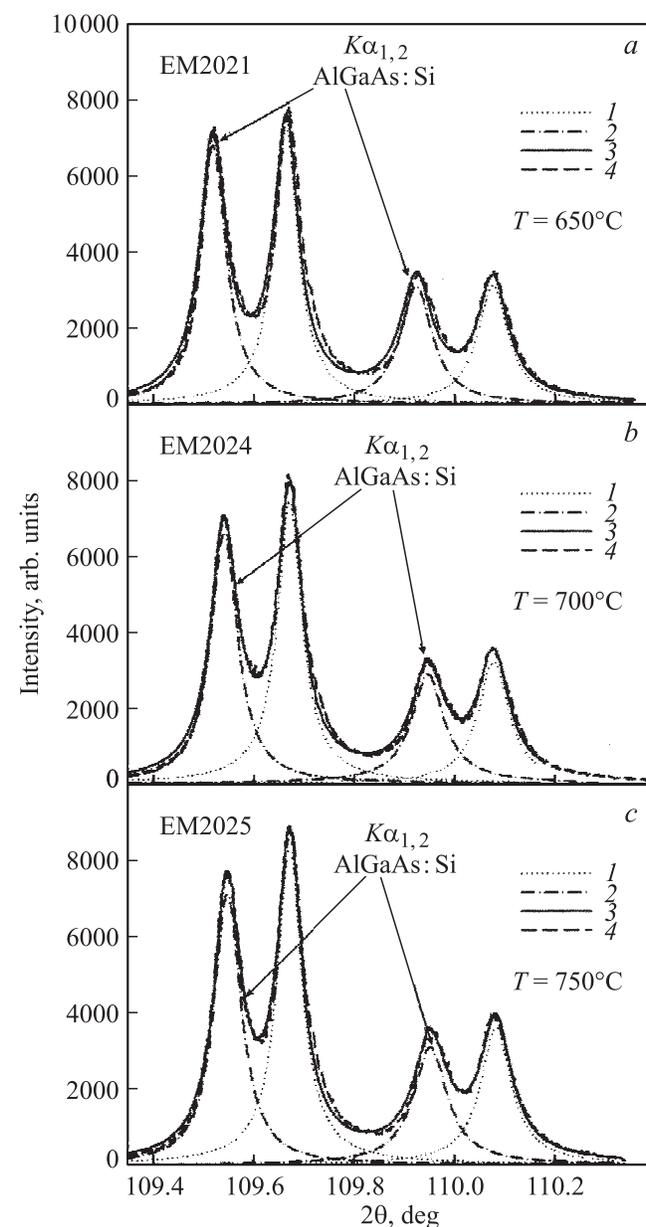
Дифракция (600) от структур с эпитаксиальными твердыми растворами  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}$  также представляет собой наложение двух  $K\alpha_{1,2}$ -дублетов, поэтому разложение и моделирование каждого из них проводилось по

вышеописанной процедуре. Параметры кристаллических решеток, рассчитанные с учетом внутренних напряжений, для исследованных образцов приведены в табл. 3.

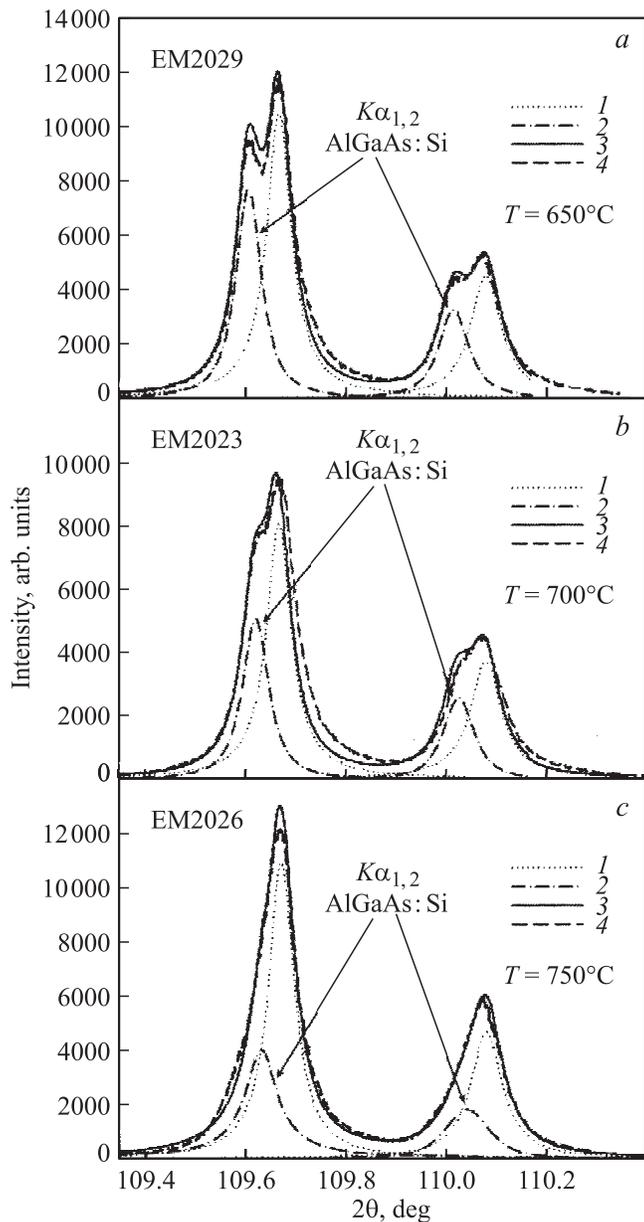
В соответствии с законом Вегарда для квазибинарной системы твердых растворов GaAs–AlAs

$$a(x) = 5.6532 + 0.0078x$$

параметры решетки твердых растворов для  $x \approx 0.25$  и  $\sim 0.40$  должны быть равными  $a^v = 5.6552$  и  $5.6564 \text{ \AA}$  соответственно, т. е. параметр решетки твердого раство-



**Рис. 5.** Профили дифракционных линий (600) от эпитаксиальных гетероструктур  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$  с  $x \approx 0.40$ , выращенных при потоке дисилана  $100 \text{ см}^3/\text{мин}$ . Образцы: *a* — EM2021, *b* — EM2024, *c* — EM2025. 1 — подложка GaAs(100), 2 — твердый раствор  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , 3 — модель, 4 — эксперимент.



**Рис. 6.** Профили дифракционных линий (600) от эпитаксиальных гетероструктур  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$  с  $x \approx 0.40$ , выращенных при потоке дисилана  $400 \text{ см}^3/\text{мин}$ . Образцы: *a* — EM2022, *b* — EM2023, *c* — EM2026. 1 — подложка GaAs(100), 2 — твердый раствор  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , 3 — модель, 4 — эксперимент.

ра всегда превышает параметр подложки GaAs ввиду больших размеров атомов Al, замещающих атомы Ga. Поэтому  $K\alpha_{1,2}$ -дублет эпитаксиального твердого раствора в нелегированных гетероструктурах всегда появляется слева от дублета подложки, т.е. сдвигается в сторону меньших углов на величину, пропорциональную содержанию Al в твердом растворе. Так происходит всегда в твердых растворах  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  в отсутствие преднамеренного легирования или непреднамеренного автолегирования эпитаксиальных слоев другими элемен-

тами [15]. Однако результаты, приведенные на рис. 3, 4 для  $x \approx 0.25$  и на рис. 5, 6 для  $x \approx 0.40$ , показывают, что  $K\alpha_{1,2}$ -дублет от эпитаксиального слоя твердого раствора может сдвигаться в сторону больших углов на величину, существенно отличающуюся от закона Вегарда (4) для тройных твердых растворов  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .

Дело в том, что результирующий сдвиг  $K\alpha_{1,2}$ -дублета определяется действием двух противоположных факторов: замещением атомов галлия атомами алюминия большего размера в металлической подрешетке и замещением атомами кремния атомов меньшего размера в обеих подрешетках  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .

Поэтому обобщенный закон Вегарда для четверной системы твердых растворов  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}-\text{Si}$  будет иметь вид

$$a(x, y) = 5.6532 + 0.0078x - 0.2222y, \quad (5)$$

где  $x$  — концентрация атомов алюминия,  $y$  — концентрация атомов кремния.

Таким образом, два фактора — растворение атомов Al и растворение атомов Si в меньшем на порядок количестве — приводят к противоположным изменениям параметра и должны компенсировать друг друга при точной оптимизации технологических параметров. Происходит ли такая компенсация в наших условиях?

Возьмем составы твердого раствора, близкие к  $x \approx 0.25$ . Для твердых растворов этих составов сразу следует отметить практически полное согласование параметра решетки с параметром подложки при достигнутых уровнях легирования кремнием (см. рис. 3, 4 и табл. 3). Наибольшее рассогласование параметров на величину  $\Delta a \pm 0.0011 \text{ \AA}$  наблюдается в гетероструктурах EM2015 и EM2016, полученных при наиболее высокой температуре  $T = 750^\circ\text{C}$ . Разность знаков рассогласования определяется разными скоростями потоков дисилана и разными температурами, которые и определяют количество внедренных атомов легирующей примеси Si, а также их положение в той или иной подрешетке.

Для твердых растворов с  $x \approx 0.40$  становится очевидной сильная зависимость степени согласования параметров решетки пленка–подложка от величины потока дисилана. При потоке  $400 \text{ см}^3/\text{мин}$  в этих твердых растворах можно достичь лучшего согласования параметров, чем при потоке  $100 \text{ см}^3/\text{мин}$  (рис. 5 и 6).

Как следует из данных микроанализа (табл. 3), во всех эпитаксиальных твердых растворах  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}$  с концентрациями Al в металлической подрешетке  $x \approx 0.40$  и в части эпитаксиальных пленок с  $x \approx 0.25$  (образцы EM2015, EM2016, EM2017) концентрация атомов галлия превышает концентрацию атомов мышьяка. Учитывая  $n$ -тип проводимости твердого раствора  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}$ , можно предполагать образование не только антиструктурных дефектов типа  $\text{Ga}_{\text{As}}$ , но и более сложных дефектов и комплексов.

Анализируя полученные результаты, можно выявить эмпирические корреляции между параметрами эпитаксиальных гетероструктур и технологическими условиями роста. Результаты показывают (табл. 1–3), что чем ниже

**Таблица 3.** Данные рентгеноструктурного анализа и рентгеновского микроанализа для гетероэпитаксиальных структур

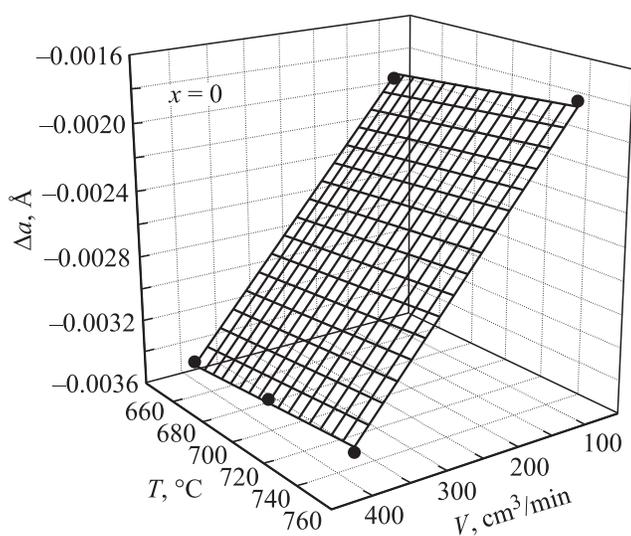
Образец	$n_{Al}$ , ат%	$n_{Ga}$ , ат%	$n_{As}$ , ат%	$n_{Si}$ , ат%	Ширина $\Delta\theta$ , град	Параметр решетки, Å	Рассогласование $\Delta a$ , Å	
							эксперимент	расчет
GaAs	—	50.0	50.0	—	0.06	5.6532	—	—
EM2015	12.0	37.8	49.5	0.6	0.07	5.6521	-0.0012	0.0005
EM2016	11.6	38.5	49.5	0.4	0.07	5.6543	0.0010	0.0010
EM2017	12.3	38.3	49.0	0.4	0.06	5.6540	0.0007	0.0010
EM2018	12.1	36.6	50.3	1.1	0.08	5.6522	-0.0010	-0.0007
EM2019	11.0	38.4	50.0	0.6	0.05	5.6525	-0.0007	0.0004
EM2021	18.9	31.3	49.4	0.4	0.06	5.6560	0.0028	0.0021
EM2022	17.5	32.0	49.6	0.9	0.06	5.6544	0.0012	0.0007
EM2023	19.8	30.6	49.4	0.6	0.06	5.6542	0.0009	0.0018
EM2024	18.3	32.2	49.4	0.0(1)	0.07	5.6557	0.0024	0.0028
EM2025	18.2	32.2	49.5	0.1	0.07	5.6556	0.0024	0.0026
EM2026	18.1	32.3	49.0	0.4	0.08	5.6540	0.0008	0.0019

Примечание.  $n_{Al}$ ,  $n_{Ga}$ ,  $n_{As}$ ,  $n_{Si}$  — концентрации элементов Al, Ga, As, Si.

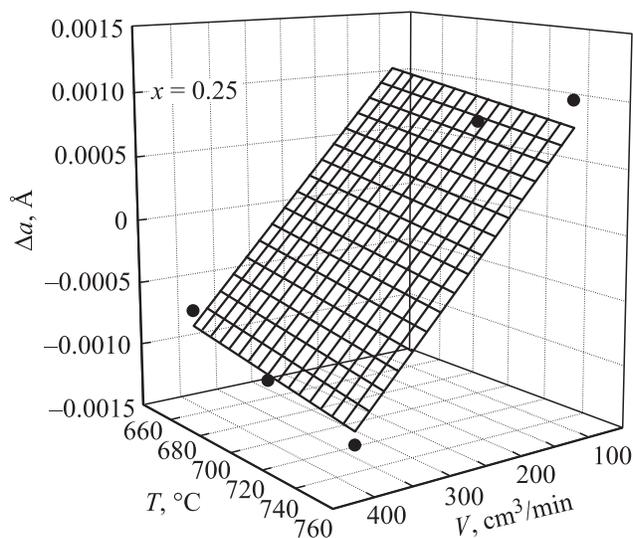
температура подложкодержателя и выше поток дислана  $Si_2H_6$ , тем выше концентрация атомов кремния в твердом растворе  $Al_xGa_{1-x}As$ . Аналогичную зависимость можно наблюдать и для холловской концентрации носителей заряда: она изменяется симбатно с температурой подложкодержателя и потоком дисилана.

Становится понятным, что управляемое введение легирующего элемента (кремния) позволяет полностью согласовать параметры решетки твердых растворов  $Al_xGa_{1-x}As$  и монокристаллической подложки GaAs, тем самым решив одну из главных задач технологии — рост согласованных по параметру решетки гетероструктур.

Для нахождения оптимального соотношения технологических параметров роста, а именно потока диси-



**Рис. 7.** Зависимость рассогласования параметров решетки пленка–подложка от потока дисилана и температуры  $\Delta a(V, T)$  для гомоэпитаксиальных структур GaAs:Si/GaAs(100).



**Рис. 8.** Зависимость рассогласования параметров решетки пленка–подложка от потока дисилана и температуры  $\Delta a(V, T)$  для эпитаксиальных гетероструктур  $Al_xGa_{1-x}As:Si/GaAs(100)$  с  $x \approx 0.25$ .

лана и температуры в реакторе, приводящих к полному согласованию параметров кристаллических решеток эпитаксиального слоя с растворенным кремнием и монокристаллической подложки, необходимо установить связь между рассогласованием параметров решеток  $\Delta a$  и ростовыми параметрами. Для этого в системе координат поток–температура–рассогласование параметров решеток ( $V - T - \Delta a$ ) на основании имеющихся данных построим диаграммы  $\Delta a(V, T)$  для гомоэпитаксиальных структур (рис. 7) и гетероструктур с  $x \approx 0.25$  и  $\sim 0.40$  (рис. 8, 9 соответственно). После этого, используя методы регрессивного анализа программного продукта Sigma Plot 11, мы можем аппроксимировать взаимосвязь между

**Таблица 4.** Результаты регрессивного анализа данных по рассогласованию параметров кристаллической решетки эпитаксиальной пленки и монокристаллической подложки в зависимости от потока дисилана и температуры в реакторе

$x$	$m \cdot 10^{-6}$	$n \cdot 10^{-6}$	$p$	Соотношение между $V$ и $T$ для согласования решеток	$n_{\text{Si}}$ , ат% (расчет)
0	-5.2722	1.1	-0.0021	$V = -0.3983 \cdot 10^3 + 0.20864T$	—
$\sim 0.25$	-6.3978	-2.44	0.0033	$V = 0.5158 \cdot 10^3 - 0.38138T$	0.87
$\sim 0.40$	-5.3333	-3.65	0.0056	$V = 1.05 \cdot 10^3 - 0.68438T$	1.40

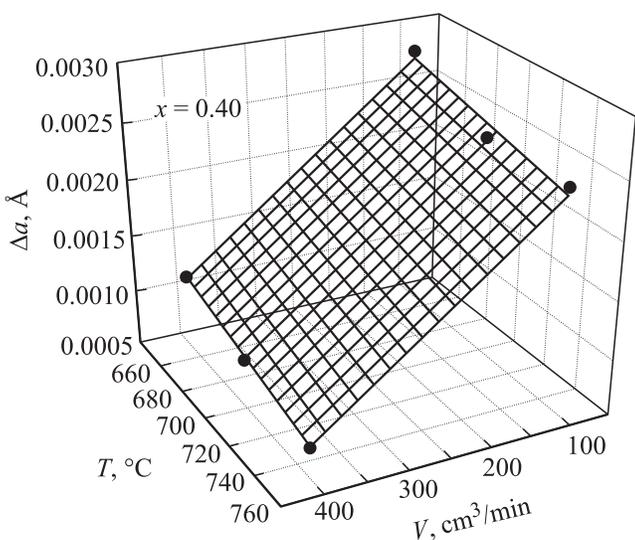
величинами плоскостью, задаваемой соотношением

$$\Delta a(V, T) = mV + nT + p, \quad (6)$$

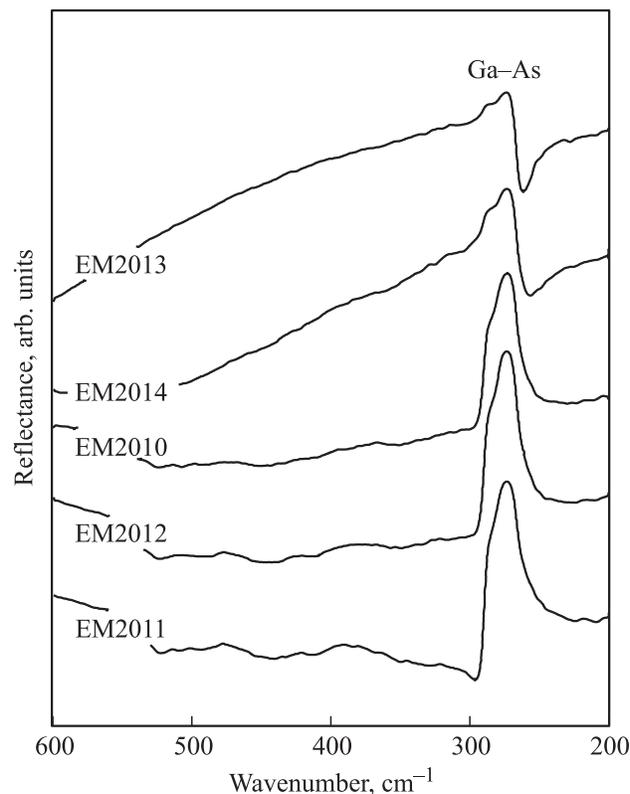
где  $m$ ,  $n$ ,  $p$  — расчетные коэффициенты.

Аппроксимация плоскостью выполняется в предположении, что зависимости  $\Delta a(V)|_{T=\text{const}}$  и  $\Delta a(T)|_{V=\text{const}}$ , являющиеся шпуром плоскости  $\Delta a(V, T)$ , линейны. Следует отметить, что отклонения величин от моделирующей плоскости (рис. 8,9) обусловлены заметным отклонением состава твердого раствора от ожидаемой средней величины.

Таким образом, для определения оптимальных величин потока дисилана и температуры, соответствующих полностью согласованной по параметру решетки пленки, достаточно выражение (6) приравнять нулю. Полученные данные в результате регрессивного анализа и расчетов оптимальных соотношений технологических параметров представлены в табл. 4. Там же приведены расчетные концентрации кремния, соответствующие полному согласованию решеток, определенные на основании соотношения (5) для четверных твердых растворов  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}$ . В случае выполнения обобщенного закона Вегарда (5) эти концентрации составляют 0.87 ат% для  $x \approx 0.25$  и 1.40 ат% для  $x \approx 0.40$ .



**Рис. 9.** Зависимость рассогласования параметров решетки пленка—подложка от потока дисилана и температуры  $\Delta a(V, T)$  для эпитаксиальных гетероструктур  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$  с  $x \approx 0.40$ .



**Рис. 10.** ИК спектры отражения от гомоэпитаксиальных структур  $\text{GaAs}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$ .

### 3.3. Инфракрасные спектры

На рис. 10 приведены ИК спектры отражения от исследуемых гомоэпитаксиальных структур  $\text{GaAs}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$ . Как видно из эксперимента, в спектрах присутствует одна колебательная мода Ga—As. В двух образцах, полученных при более высоких температурах (750°C), в области 300–500  $\text{cm}^{-1}$  появляется особенность, характерная для возникновения колебаний электронной плотности, фонов-плазменный резонанс. Возникновение плазменных колебаний в эпитаксиальной пленке (появление плазмонов) при легировании с образованием  $n$ -типа проводимости наблюдается лишь в гомоэпитаксиальных гетероструктурах с холловскими концентрациями носителей  $\sim 10^{18} \text{cm}^{-3}$ .

Однако в остальном ИК спектры легированных гомоэпитаксиальных структур оказываются практически

нечувствительными к уменьшению кристаллических параметров пленки в результате образования твердого раствора GaAs:Si.

Относительно оптических свойств гетероструктур экспериментально показано, что в спектрах отражения неупорядоченных твердых растворов  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  различных составов ( $0 < x < 1$ ) всегда присутствуют две основные колебательные моды, к которым относят моду Al–As (с ростом концентрации Al в  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  интенсивность этой моды увеличивается) и моду Ga–As (изменяющую свою интенсивность противоположно по отношению к моде Al–As, т.е. в соответствии с содержанием Ga в твердом растворе  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ).

На рис. 11 и 12 представлены экспериментальные спектры отражения от эпитаксиальных гетероструктур  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$  для концентрации Al  $\approx 0.25$  и  $\sim 0.40$  соответственно, в каждом из которых присутствуют две основные фоновые моды Al–As и Ga–As. Анализ спектров показывает, что моды основных колебаний в образцах с близким содержанием Al в твердом растворе совпадают по частотам TO- и LO-фононов, при этом незначительно меняется форма основных фоновых мод. Для концентрации алюминия  $x \approx 0.25$  частоты основных колебаний соответствуют  $\omega_{\text{TO}(\text{GaAs})} \approx 271.7 \text{ см}^{-1}$ ,  $\omega_{\text{LO}(\text{GaAs})} \approx 284.5 \text{ см}^{-1}$ ,  $\omega_{\text{TO}(\text{AlAs})} \approx 358.0 \text{ см}^{-1}$ ,  $\omega_{\text{LO}(\text{AlAs})} \approx 372.7 \text{ см}^{-1}$ , а для гетероструктур с  $x \approx 0.40$  —  $\omega_{\text{TO}(\text{GaAs})} \approx 271.0 \text{ см}^{-1}$ ,  $\omega_{\text{LO}(\text{GaAs})} \approx 286.0 \text{ см}^{-1}$ ,  $\omega_{\text{TO}(\text{AlAs})} \approx 364.0 \text{ см}^{-1}$ ,  $\omega_{\text{LO}(\text{AlAs})} \approx$

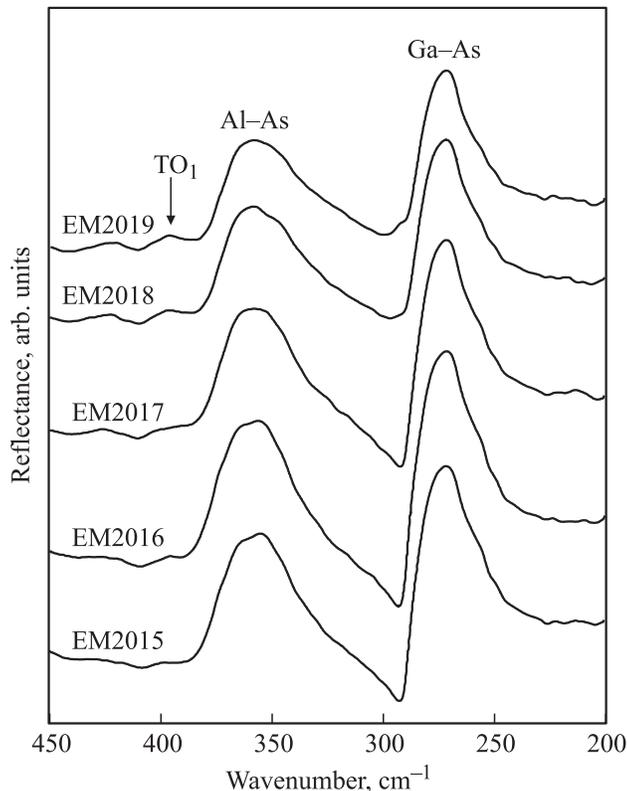


Рис. 11. ИК спектры отражения от эпитаксиальных гетероструктур  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$  с  $x \approx 0.25$ .

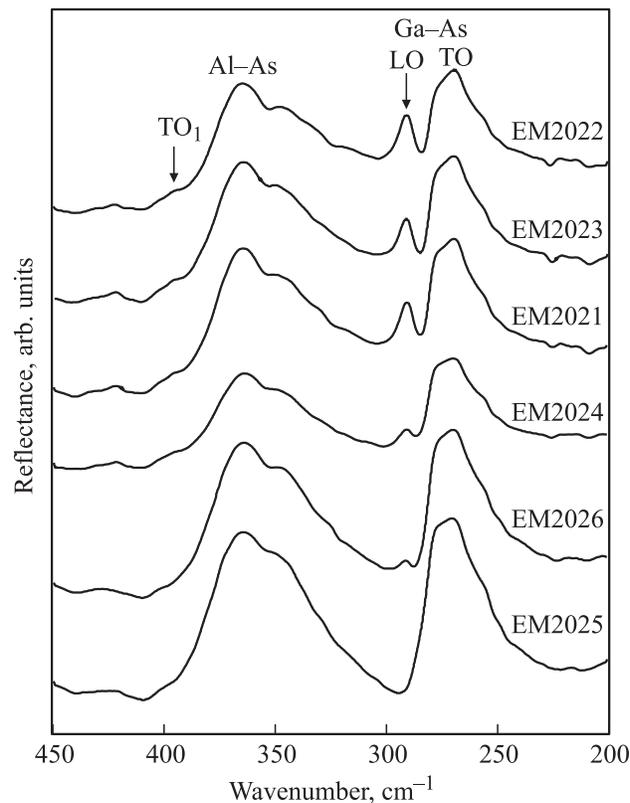
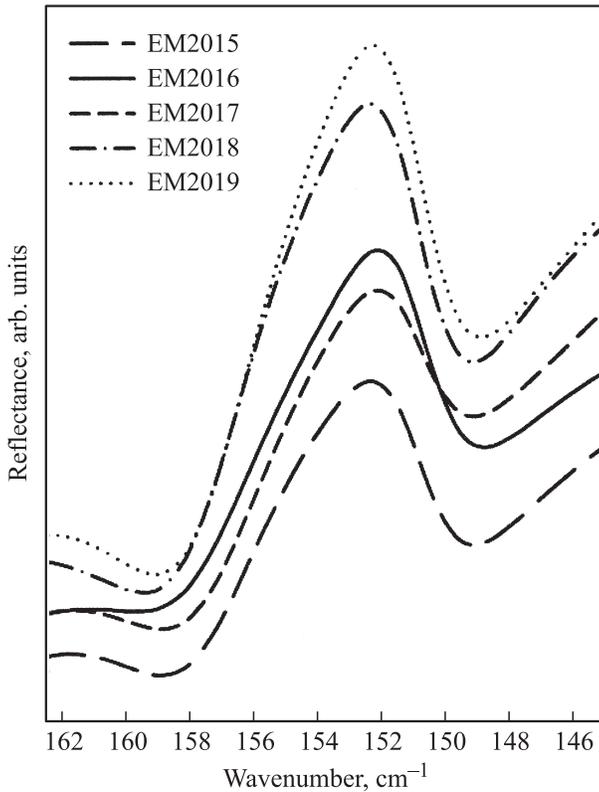


Рис. 12. ИК спектры отражения от эпитаксиальных гетероструктур  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$  с  $x \approx 0.40$ .

$\approx 386.0 \text{ см}^{-1}$ . Следует отметить, что частоты продольных и поперечных колебаний основных мод несколько отличаются от аналогичных частот для неупорядоченных нелегированных твердых растворов [16].

Помимо небольших смещений основных колебательных мод, образование твердых растворов с кремнием вызывает появление дополнительных колебаний в спектрах почти всех образцов гетероструктур  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$ . В ИК спектрах отражения гетероструктур с концентрациями алюминия  $x \approx 0.25$  появляется дополнительная фоновая мода с частотой  $\sim 153 \text{ см}^{-1}$  (рис. 13). Интенсивность этой моды возрастает с ростом концентрации кремния в твердом растворе. Кроме того, в спектрах отражения гетероструктур обоих составов появляются в виде плечей малой интенсивности колебательные моды ( $\text{TO}_1$ ), локализованные в области  $400 \text{ см}^{-1}$  (рис. 11, 12). Эти слабые моды в гетероструктурах  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$  с  $x \approx 0.25$  и  $\sim 0.40$  могут быть связаны с растворением кремния в кристаллической решетке. Так, согласно литературным данным [6], колебательные моды с частотами, близкими к  $385 \text{ см}^{-1}$ , связываются с атомами кремния Si, занимающими места в металлической подрешетке —  $\text{Si}_{\text{Ga}}$  или  $\text{Si}_{\text{Al}}$ .

В гетероструктурах с содержанием алюминия в металлической подрешетке  $x \approx 0.40$  появляется еще одна дополнительная колебательная мода с частотой



**Рис. 13.** Дополнительная фоновая мода в ИК спектрах отражения от эпитаксиальных гетероструктур  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$  с  $x \approx 0.25$ .

той  $\sim 291.0 \text{ cm}^{-1}$  (рис. 12), интенсивность которой возрастает с ростом концентрации атомов кремния  $n_{\text{Si}}$  в твердом растворе  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}$  и достигает своего максимума в образце EM2022 с  $n_{\text{Si}} \approx 1 \text{ ат}\%$ .

Появление этого колебания может быть следствием либо возникновения колебаний атомов кремния с ближайшими соседями типа Si–As или Si–Ga, либо расщепления соседней фоновой моды Ga–As от твердого раствора  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}$ .

Простейший расчет частот колебаний ближайших соседей для алмазоподобной решетки можно выполнить на основе модели, предложенной Харрисоном [17] и успешно апробированной в [18]. Определим силовые константы  $C_0$  и  $C_1$  как

$$\begin{aligned} C_0 &= (3a^3/16)(c_{11} + 2c_{12}), \\ C_1 &= (a^3/32)(c_{11} - c_{12}), \end{aligned} \quad (7)$$

где  $a$  — параметр кристаллической решетки,  $c_{11}$  и  $c_{12}$  — коэффициенты тензора напряжений для твердого раствора  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . Тогда мы можем оценить частоту LO-фонона возникающих колебаний как

$$\omega_{\text{LO}}^2 = (8/3\mu d^2)(C_0 + 8C_1), \quad (8)$$

где  $\mu$  — приведенная масса колеблющихся атомов,  $d$  — расстояние между ними. Зависимости коэффициентов тензора напряжений в системе твердых растворов  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  от концентрации алюминия взяты из [19].

Расчеты в данном приближении показали, что оцененные таким образом частоты колебаний не совпадают с полученной нами в эксперименте частотой. Поэтому, вероятнее всего, обнаруженная в ИК спектрах отражения эпитаксиальных гетероструктур  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$  фоновая мода с частотой  $\sim 291 \text{ cm}^{-1}$  и совпадающая по частоте с продольным оптическим фононом GaAs возникает вследствие расщепления TO- и LO-фононов моды Ga–As.

#### 4. Заключение

Совместный анализ экспериментальных данных, полученных методом рентгеновской дифракции, ИК спектроскопии отражения, элементного микроанализа, холловских измерений, и результатов моделирования технологических условий позволяет сделать некоторые выводы о влиянии легирования кремнием на гомоэпитаксиальные структуры GaAs:Si/GaAs(100) и гетероструктуры  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$  с различным содержанием алюминия в твердом растворе и легирующего элемента Si.

Образование твердых растворов с кремнием в высоколегированных гомоэпитаксиальных слоях гетероструктур GaAs:Si/GaAs(100) приводит к уменьшению параметра кристаллической решетки эпитаксиального слоя и отрицательной величине рассогласования с параметром монокристаллической подложки,  $\Delta a < 0$ . Возникающие при этом механические напряжения и дефекты приводят к заметному увеличению ширины на полувысоте дифракционных  $K\alpha_{1,2}$ -линий эпитаксиального слоя по сравнению с подложкой.

Такой же высокий уровень легирования кремнием эпитаксиальных слоев в гетероструктурах  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$  с образованием четверных твердых растворов не приводит к существенным напряжениям кристаллической решетки, о чем свидетельствуют сравнимые значения ширины на полувысоте дифракционных  $K\alpha_{1,2}$ -дублетов от твердых растворов и монокристаллической подложки GaAs(100).

Введением кремния в эпитаксиальные слои гетероструктур  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$  можно добиться полного согласования параметров кристаллических решеток пленки и подложки,  $\Delta a = 0$ , в условиях выполнения обобщенного закона Вегарда (5). Уровень легирования кремнием, соответствующий  $\Delta a = 0$ , определяется значениями  $x$ .

Данные сканирующей электронной микроскопии показывают, что все выращенные образцы практически имеют поверхность, свидетельствующую о достаточно высокой однородности образцов эпитаксиальных гетероструктур, выращенных МОС-гидридным методом.

Тем не менее следует учитывать, что высокий уровень легирования кремнием должен был привести к повышенной концентрации носителей, до  $\sim 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ . Однако холловские измерения показали существенно меньшие значения. Такие значительные отклонения от

ожидаемых величин с учетом заметных отклонений параметра решетки от обобщенного закона Вегарда (5) свидетельствуют об образовании глубоких уровней, обусловленных сложными дефектами и комплексами, возникающими в результате образования тройных и четверных твердых растворов с кремнием.

Авторский коллектив благодарит сотрудника кафедры Физики твердого тела и наноструктур Е.И. Завалишина за ценные советы при обсуждении результатов.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 09-02-97505-р\_центр\_а) и ФЦП „Научные и научно-педагогические кадры инновационной России“ на 2009–2013 годы (проекты № 2010-1.3.2-121-018-016 и 2010-1.3.1-121-018-030).

## Список литературы

- [1] S.M. Sze. *Physics of Semiconductor Devices* (N.Y., John Wiley and Sons, 1981).
- [2] C. Kolm, S.A. Kulin, B.L. Averbach. *Phys. Rev.*, **108**, 965 (1957).
- [3] A.S. Jordan, M.E. Weiner. *J. Electrochem. Soc.*, **121**, 1634 (1974).
- [4] N. Chand, T. Henderson, J. Klem, W.T. Masselink, R. Fischer, Y.-Ch. Chang, H. Morkoc. *Phys. Rev. B*, **30**, 4481 (1984).
- [5] M. Mizuta, M. Tachikawa, H. Kukimoto, S. Minomura. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **24**, L143 (1985).
- [6] D.J. Chadi, K.J. Chang. *Phys. Rev. B*, **39**, 10 063 (1989).
- [7] J. Dabrowski, M. Scheffler. *Mater. Sci. Forum*, **83–87**, 735 (1992).
- [8] D.N. Talwar, M. Vandevyver. *Phys. Rev. B*, **40**, 9779 (1989).
- [9] П.В. Середин, А.В. Глотов, Э.П. Домашевская, И.Н. Арсентьев, Д.А. Винокуров, А.Л. Станкевич, И.С. Тарасов. *ФТП*, **43** (12), 1654 (2009).
- [10] П.В. Середин, Э.П. Домашевская, А.Н. Лукин, И.Н. Арсентьев, Д.А. Винокуров, И.С. Тарасов. *ФТП*, **42** (9), 1072 (2008).
- [11] *Handbook of Semiconductor Technology*, ed. by K.A. Jackson, W. Schröter (John Wiley & Sons, 2000).
- [12] D. Zhou, B.F. Usher. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **34**, 1461 (2001).
- [13] Z.R. Wasilewski, M.M. Dion, D.J. Lockwood, P. Poole, R.W. Streater, A.J. Spring Thorpe. *J. Appl. Phys.*, **81**, 1683 (1997).
- [14] S. Fleischer, C.D. Beling, S. Fung, W.R. Nieveen, J.E. Squire, J.Q. Zheng, M. Missous. *J. Appl. Phys.*, **81**, 1 (1997).
- [15] 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**, 354 (2005).
- [16] M. Pegems, G.L. Pearson. *Phys. Rev. B*, **1** (4), 1576 (1970).
- [17] W.A. Harrison. *Electronic Structure and the Properties of Solids* (W.H. Freeman, San Francisco, 1980).
- [18] D. Wolverson, D.M. Bird, C. Bradford, K.A. Prior, B.C. Cavenett. *Phys. Rev. B*, **64**, 113 203 (2001).
- [19] 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.

Редактор Л.В. Шаронова

## Effect of silicon on crystal lattice in MOCVD $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$ heterostructures

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

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

**Abstract** The data are presented on X-ray diffraction and infrared spectroscopy obtained for MOCVD  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$  heterostructures and homoepitaxial  $\text{GaAs}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$  structures doped with silicon up to  $\sim 1\%$ . It is shown that formation of solid solutions with silicon in homoepitaxial structures leads to a decrease of the lattice parameters of the epitaxial layer and a negative value of the mismatch with the single crystal substrates parameter,  $\Delta a < 0$ . At the same time, formation of quaternary solid solutions in  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}/\text{GaAs}(100)$  heterostructures does not lead to significant stresses in the crystal lattice. The introduction of silicon in the epitaxial layers of these heterostructures allows to complete harmonization of the lattice parameters of the film and the substrate by means of appropriate selection of technological conditions the epitaxial growth.