

# Туннельно-связанные квантовые ямы InGaAs/GaAs: структура, состав и энергетический спектр

© С.В. Хазанова<sup>¶</sup>, Н.В. Байдусь\*, Б.Н. Звонков\*, Д.А. Павлов, Н.В. Малехонова, В.Е. Дегтярев, Д.С. Смотрин, И.А. Бобров

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

\* Научно-исследовательский физико-технический институт Нижегородского государственного университета,  
603950 Нижний Новгород, Россия

(Получена 25 апреля 2012 г. Принята к печати 25 апреля 2012 г.)

Предложен комплексный подход к анализу гетероструктур с туннельно-связанными квантовыми ямами InGaAs/GaAs, использующий как экспериментальные, так и теоретические методы исследования. Методом просвечивающей электронной микроскопии совместно с методикой энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии было определено распределение состава твердого раствора InGaAs. Экспериментально измерены спектры фотолюминесценции и фотопроводимости для данных структур. С целью более детальной интерпретации результатов проведено компьютерное моделирование эпитаксиального роста. Путем совместного решения уравнений Шредингера и Пуассона рассчитаны энергетические состояния в квантово-размерной гетероструктуре исходного и реального профилей состава. Проведено сравнение результатов расчета и данных о межзонных оптических переходах, полученных из анализа спектральных зависимостей фотолюминесценции и фотопроводимости. Получено хорошее согласие экспериментальных и теоретических результатов. Данный подход позволяет уточнить истинную геометрию структуры, сопоставить результаты спектров и реального профиля структуры, скорректировать параметры структуры и роста для улучшения оптических характеристик.

## 1. Введение

Гетероструктуры (ГС) InGaAs/GaAs с квантовыми ямами (КЯ) вызывают значительный интерес благодаря их широкому применению в современной оптоэлектронике. В последнее время возрос интерес к источникам излучения в различных областях инфракрасного (ИК) диапазона [1]. Принцип действия подобных источников во многих случаях основан как на межзонных, так и на межподзонных переходах в квантовых ямах. Однако энергетические характеристики и излучающие свойства структур весьма чувствительны к распределению состава и упругих деформаций, которые определяются деталями процесса роста. В данной работе представлены результаты исследований гетероструктуры с туннельно-связанными квантовыми ямами, предназначенной для исследований пространственного переноса [2]. Гетероструктуры такого типа обычно представляют собой чередование областей с высокой и низкой подвижностью электронов, туннельно-связанных между собой. Известно, что снижение подвижности достигается за счет большого количества гетерограниц в более узких КЯ. В исследуемой структуре областью с высокой подвижностью является широкая КЯ, а областью с низкой подвижностью — шесть узких КЯ. В то же время для получения терагерцового излучения в таких структурах энергии межподзонных переходов не должны превышать 10–20 мэВ. Одновременное выполнение этих условий требует высокой точности технологического процесса и необходимости учета ряда сопутствующих явлений,

главным из которых является сегрегация индия, существенно влияющая на профиль потенциала и энергии переходов. Исследование степени размытия гетерограниц от параметров роста остается важной технологической задачей.

Цель данной работы — восстановление реальной энергетической структуры на основе экспериментальных результатов и теоретических расчетов. Экспериментальные результаты получены методом сканирующей просвечивающей электронной микроскопии, фотолюминесценции и межзонной фотопроводимости. Численно осуществлено моделирование процесса эпитаксиального роста методом Монте-Карло, а также с использованием реального профиля состава с помощью совместного решения уравнений Шредингера и Пуассона получена зонная диаграмма и энергетические характеристики структуры. В литературе известны различные модели описания сегрегационных процессов, использующие в основном феноменологические параметры. Необходимо отметить, что именно моделирование Монте-Карло, фактически имитируя процесс роста с реальными энергиями связи компонентов состава, позволяет получить профиль с любой заданной геометрией и параметрами роста. Исследования сильнополевого транспорта и получение терагерцового излучения гетероструктуры выходят за рамки данной работы.

## 2. Образцы и методика измерений

Гетероструктуры с туннельно-связанными квантовыми ямами выращены методом МОС-гидридной эпитаксии

<sup>¶</sup> E-mail: khazanova@phys.unn.ru

при атмосферном давлении при температуре подложки 600°C на полуизолирующих подложках (001) арсенида галлия. Источниками элементов являлись арсин, фосфин, триметилгаллий и триметилиндий. Исследуемая в данной работе гетероструктура состояла из двадцати периодов туннельно-связанных КЯ. Каждый период толщиной 80 нм состоял из одной широкой КЯ толщиной 16 нм и шести узких (по 2.4 нм), расположенных симметрично по три с обеих сторон широкой КЯ. Ожидаемая толщина туннельных барьеров между узкими КЯ составляла 2.4 нм, а между узкими и широкой — 5 нм. Заданное относительное содержание индия в газовом потоке составляло 14% для широкой и 32% для узких КЯ соответственно. Для компенсации упругих напряжений сжатия, создаваемых слоями InGaAs, в середине каждого периода на равном расстоянии от КЯ выращивали слой GaAsP с содержанием фосфора 10% толщиной 10 нм. Предварительный расчет режимов роста гетероструктуры выполнялся с учетом ранее полученных данных о влиянии сегрегации индия на реально получаемый профиль состава [3,4] и с учетом требований предполагаемой зонной диаграммы.

Спектры фотолуминесценции (ФЛ) измерялись при температуре 77 К по стандартной методике с применением синхронного детектирования с помощью фотоэлектронного умножителя, решеточного монохроматора МДР-23 при возбуждении сфокусированным лучом гелий-неонового лазера. Спектральные зависимости продольной фотопроводимости (ФП) измерялись на таком же монохроматоре при фотовозбуждении светом галогеновой лампы. К омическим контактам образца прикладывалось напряжение  $V = 1$  В. Измерения проводились при  $T = 77$  К.

Методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) были произведены структурные исследования поперечного среза образца, а также анализ его элементного состава в направлении роста структуры. Препарирование объекта осуществлялось по стандартной технологии, разработанной фирмой Gatan [5]. Периодическая структура с квантовыми ямами InGaAs/GaAs исследовалась на просвечивающем электронном микроскопе JEM-2100F компании JEOL. Ускоряющее напряжение составляло 200 кэВ. Были получены изображения структуры как в режиме просвечивающего микроскопа, так и в сканирующем режиме (СПЭМ). На снимках высокого разрешения отчетливо различается атомная решетка исследуемого объекта, наблюдается его высокое структурное совершенство. Снимки, полученные в режиме СПЭМ, указывают на неравномерное распределение по толщине квантовых ям на протяжении всей структуры, а также на наличие шероховатости в плоскости роста (рис. 1, *a*). На снимках, полученных в режиме СПЭМ, наблюдается существенное размытие границ квантовых ям (рис. 1, *a*). Формирование изображения в этом случае происходит за счет Z-контраста между слоями твердого раствора InGaAs и матрицы GaAs. Учитывая

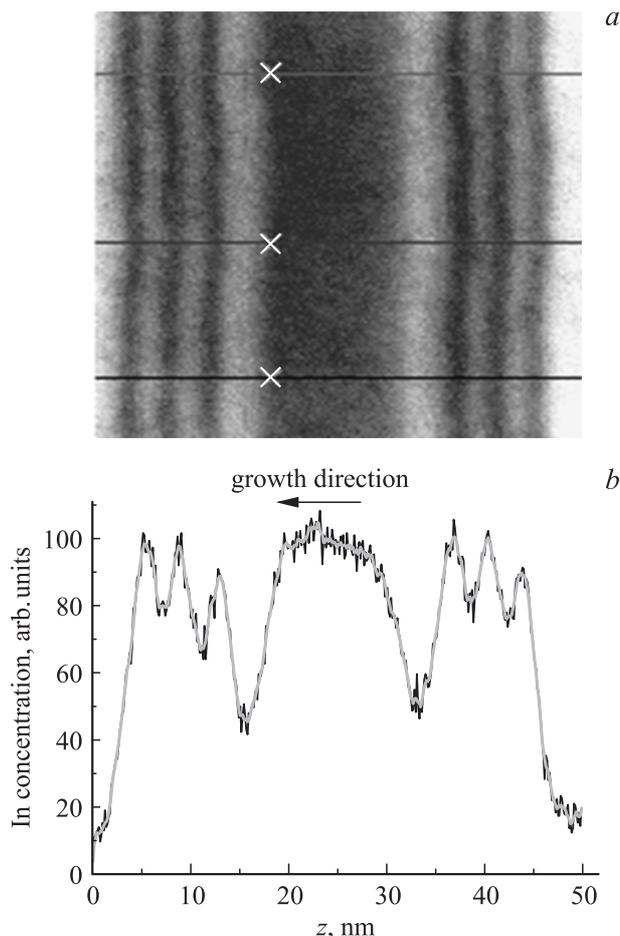
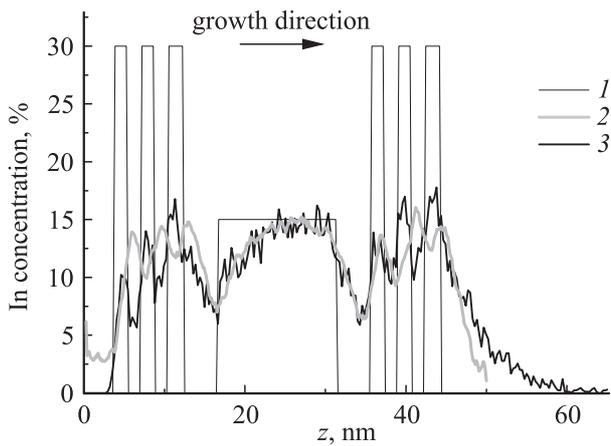


Рис. 1. *a* — изображение СПЭМ; *b* — усредненный профиль содержания индия в одном периоде гетероструктуры, полученный из измерений СПЭМ.

особенности взаимодействия электронов в кинематическом приближении с атомами, обладающими различной атомной массой, можно предположить, что распределение контраста на СПЭМ изображении дает качественную оценку распределения индия в исследуемой структуре [6]. Для построения профиля распределения по периоду была проведена цифровая обработка СПЭМ снимков в программе SPMLab 5.01, разработанной для обработки топографических изображений, получаемых в методе сканирующей зондовой микроскопии (СЗМ). В результате анализа получен профиль относительного распределения индия в направлении роста (рис. 1, *b*).

Количественный анализ элементного состава структуры проводился с помощью электронно-зондовой энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (ЭДС). Для этого применялся энергодисперсионный спектрометр INCA EnergyTEM 250 на основе беззотного детектора X-Max компании Oxford instruments, смонтированный на просвечивающем электронном микроскопе JEM-2100F. Диаметр электронного пучка в эксперименте составлял 0.7 нм. При проведении профилирования фактором, ограничивающим точность измерений, явля-



**Рис. 2.** Профили содержания In в многобарьерной структуре: 1 — распределение триметилиндия в газовом потоке (прямоугольный профиль состава), 2 — полученный по данным микроскопии и ЭДС-анализа, 3 — полученный моделированием процесса роста.

ется дрейф, связанный как с поведением самого объекта под пучком, так и с долговременными нестабильностями в ускоряющей и электронно-оптической системах микроскопа. Другими словами, методика ЭДС не дает полной картины профиля состава, но позволяет достаточно точно определить процент содержания индия в слоях твердого раствора. Таким образом, мы полагаем, что данные по Z-контрасту, масштабированные с помощью ЭДС-анализа, представляют реальный профиль состава (рис. 2).

### 3. Моделирование роста

Для дополнительного количественного анализа реального профиля было проведено численное моделирование роста одного периода данной структуры, содержащего широкую (16 нм) и 6 узких (2.4 нм) квантовых ям  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  с различным заданным составом:  $x = 0.15$  и  $0.32$  соответственно (см. рис. 2). Модельный рост гетероэпитаксиальной структуры осуществляется методом Монте-Карло. Моделирование роста методом Монте-Карло [7], используя микроскопический подход, обеспечивает реалистичное описание поверхностной сегрегации индия при эпитаксии  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  в терминах энергии связи компонентов и параметров процесса роста. Алгоритм моделирования включает в себя два конкурирующих процесса: осаждение на подложку атомов In и Ga и их поверхностную диффузию. Вероятность этих процессов определяется как энергией связи с подложкой, так и количеством латеральных связей:

$$E_d = E_s + pE_{[110]} + qE_{[1\bar{1}0]},$$

где  $E_s$  — энергия связи атома с подложкой, различная для атомов Ga и In,  $p$  и  $q$  обозначают числа соседей по катионной подрешетке. В общем случае диффузия

атомов анизотропна. Ранее было показано, что на степень размытия профиля значительным образом влияет температура роста и скорость потока осаждаемых атомов [8]. Таким образом, основываясь на данных по содержанию компонент в потоке в процессе роста и варьируя температуру, средствами моделирования мы получили профиль состава, во многом совпадающий с результатами микроскопии.

На рис. 2 приведены профили состава одного периода исследуемой структуры. Прямоугольный профиль описывает распределение триметилиндия (ТМИ) в газовом потоке (исходный профиль состава), два других получены из результатов микроскопии (СПЭМ) совместно с количественным анализом методики ЭДС и путем моделирования с учетом сегрегации. Наблюдается хорошее согласие расчетного и экспериментального профилей распределения индия.

### 4. Результаты и обсуждение

Известно, что размытие гетерограниц происходит вследствие физических процессов, происходящих в процессе роста гетероструктуры [3,4]. В частности, эффект сегрегации индия приводит к вытеснению атомов In из растущего слоя и искажению профиля состава. Численное моделирование роста подобных структур с учетом эффекта сегрегации позволяет скорректировать ширину ям и барьеров с целью оптимизации технологических параметров. Оно также позволяет провести анализ экспериментальных данных с учетом реальных неоднородностей состава и структуры гетерограниц. Проведено сравнение экспериментальных профилей состава с профилями, полученными моделированием процесса роста с учетом сегрегации индия.

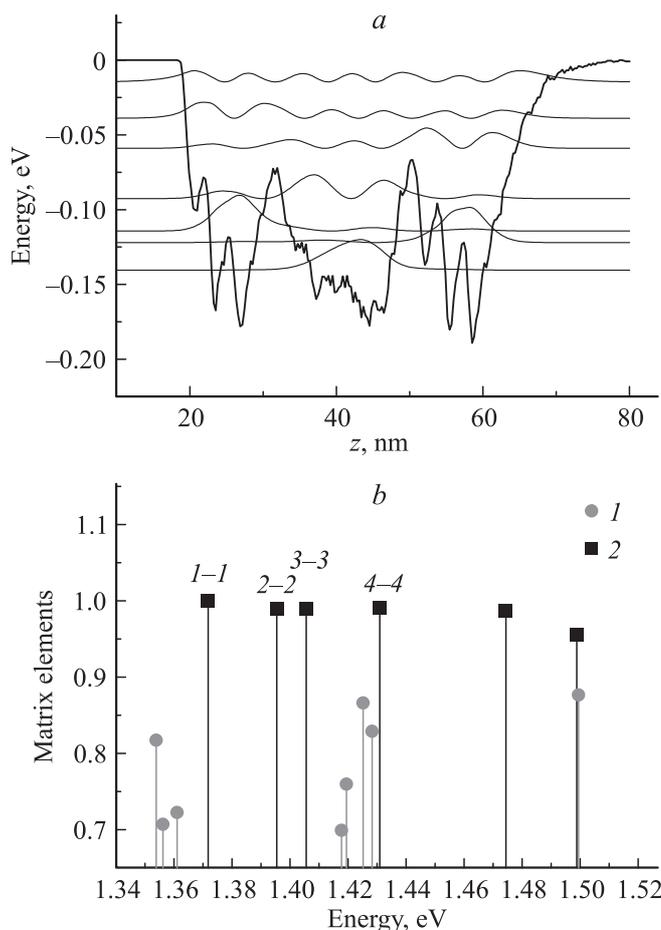
Хорошее согласие реального и смоделированного профиля позволяет утверждать, что основным фактором, влияющим на размытие гетерограниц, является сегрегация индия. Как видно из рис. 2, наличие сегрегации приводит к сильному искажению прямоугольного профиля, делая его несимметричным. Фактически размытие вследствие сегрегации приводит к значительному изменению состава твердого раствора в узких ямах. Кроме того, сравнение модельного и экспериментального профилей позволило обнаружить несоответствия реально выращенных ям с ожидаемыми значениями состава. Другими словами, КЯ оказываются более узкими и неодинаковыми по толщине, что также может приводить к изменениям в спектре.

„Электронный“ и „дырочный“ спектры в квантовой структуре весьма чувствительны к распределениям состава и упругих деформаций. На основании экспериментальных и модельных данных по профилю состава был восстановлен реальный профиль потенциала туннельно-связанных квантовых ям. Полученный таким образом профиль  $E_c(z)$  был использован в решении уравнения Шредингера совместно с уравнением Пуассона. Были

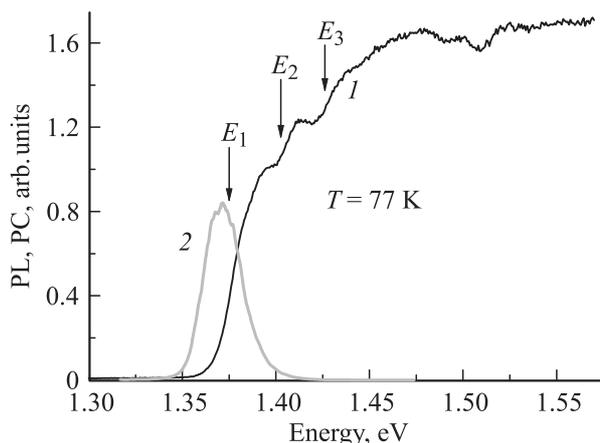
вычислены энергии оптических переходов, квадраты волновых функций электронов и дырок в квантовых ямах (рис. 3, *a, b*).

Волновые функции, соответствующие квантовым состояниям в ямах, сильно зависят от формы профиля потенциала. Исследовано влияние геометрии структуры на локализацию волновых функций в координатном пространстве. Искажение профиля потенциала приводит к заметному изменению локализации волновых функций электронов и дырок, положения энергетических уровней. На рис. 3, *b* показано, как меняются вероятности оптических переходов для реального профиля по сравнению с первоначально заданным профилем состава.

Рассчитанные энергии оптических переходов сравнивались с результатами измерений спектров ФЛ и ФП в исследуемых структурах (рис. 4). Дифференцируя спектр фотопроводимости, можно извлечь значения энергий трех оптических переходов  $h\nu = 1.37, 1.40, 1.43$  эВ. Стрелками показаны участки с максимальной производной в спектре ФП, соответствующие этим значениям. Предполагается, что первое значение энергии



**Рис. 3.** *a* — профиль дна зоны проводимости исследуемой структуры, рассчитанные электронные уровни и волновые функции; *b* — рассчитанные матричные элементы межзонных переходов: 1 — для прямоугольного профиля состава, 2 — для реального профиля.



**Рис. 4.** Спектры фотопроводимости (PC) (1) и фотолюминесценции (PL) (2), измеренные при  $T = 77$  К.

соответствует оптическому переходу с участием волновых функций электронов и дырок, локализованных преимущественно в широкой КЯ. Вероятнее всего, переходы с более высокими энергиями получаются наложением пиков с близкими по значению энергиями. Из сравнения рис. 3, *b* и 4 видно, что экспериментальные энергии оптических переходов хорошо согласуются с расчетами для реального профиля. Вклад в спектры ФП дают все оптические переходы, в ФЛ — только от перехода с минимальной энергией.

Сравнения с расчетами матричных элементов для межзонных переходов  $\langle \Psi_i^{hh} | \Psi_j^e \rangle$  показывают (рис. 3), что наиболее вероятным в спектре ФЛ можно считать основной оптический переход  $e_1 - hh_1$ , волновые функции которого локализованы в широкой яме. Из сопоставления спектров ФП и ФЛ видно, что пик ФЛ расположен ниже по энергии в сравнении с энергией перехода, полученной из ФП. Данный факт можно объяснить влиянием неоднородности состава и толщины КЯ в плоскости роста, другими словами, наличием шероховатостей гетерограниц, которые наблюдаются на снимках СПЭМ. Сдвиг пика ФЛ на 7–10 мэВ в сторону более низких энергий соответствует значению неоднородности по толщине порядка 1 нм, наблюдаемой на СПЭМ изображении, и подтверждается расчетными оценками.

Как известно, учет эффекта сегрегации в слоях  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  приводит к заметному искажению потенциального профиля ям и барьеров, а следовательно, к изменению положения уровней в квантовой яме и величины матричных элементов (рис. 3). Показано, что энергии оптических переходов для реального профиля и для исходного прямоугольного заметно различаются. Другими словами, при анализе оптических и электрофизических характеристик структуры необходимо учитывать эффект размытия гетерограниц. Необходимо также отметить влияние флуктуации состава, приводящее к уширению уровней. С учетом проведенных исследований можно

скорректировать параметры роста для улучшения требуемых параметров гетероструктур.

Наши исследования показывают, что для уменьшения эффекта сегрегации и улучшения качества границ необходимо понижение температуры роста примерно на 30–50°C. Однако необходимо учитывать тот факт, что слишком сильное снижение температуры может привести к ухудшению качества слоев из-за нарушения протекания реакций разложения металлоорганических соединений и гидридов. Поскольку сильное размытие гетерограниц приводит к изменению предполагаемой геометрии структуры, для получения требуемой энергетической структуры возможно либо изменение толщины слоев, содержащих индий, либо само содержание индия. С другой стороны, можно заметить, что отклонение профиля от прямоугольного не всегда приводит к ухудшению оптических и транспортных свойств гетероструктур. Таким образом, можно скорректировать технологические режимы роста, сохранив при этом хорошие оптические свойства сверхрешетки в целом.

## 5. Заключение

Таким образом, проведен подробный комплексный анализ гетероструктур InGaAs/GaAs. Экспериментально получены профили состава методами просвечивающей электронной микроскопии, измерены спектры фотопроводимости и фотолюминесценции. Численно осуществлено моделирование процесса роста данных структур и проведен расчет энергетического спектра. Данная методика расчетов позволяет исследовать влияние ширины туннельных барьеров на положение уровней в квантово-размерной гетероструктуре, а следовательно, на энергию межзонных и межподзонных оптических переходов. Подобные исследования и расчеты могут служить методом диагностики и прогнозирования качества гетерограниц в структурах, выращиваемых для оптоэлектронных приборов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты № 10-02-00501-а и 11-02-90454-Укр\_ф\_а).

## Список литературы

- [1] Н.В. Байдусь, П.А. Белевский, А.А. Бирюков, В.В. Вайнберг, М.Н. Винославский, А.В. Иконников, Б.Н. Звонков, А.С. Пилипчук, В.Н. Порошин. ФТП, **44** (11), 1543 (2010).
- [2] Z.S. Gribnikov, K. Hess, G.A. Kosinovsky. J. Appl. Phys., **77** (4), 1337 (1995).
- [3] M. Schowalter, A. Rosenauer, D. Gerthsen. Appl. Phys. Lett., **88**, 111 906 (2006).
- [4] Ю.Н. Дроздов, Н.В. Байдусь, Б.Н. Звонков, М.Н. Дроздов, О.И. Хрыкин, В.И. Шашкин. ФТП, **37**, 203 (2003).
- [5] *User's Guide: Precision Ion Polishing System* (Gatan inc., revision 3, 11. 1998).
- [6] S.J. Pennycook. Ultramicroscopy, **30**, 58 (1989).
- [7] N. Grandjean, J. Massies, M. Leroux. Phys. Rev. B, **53**, 998 (1996).

- [8] S.V. Khazanova, M.I. Vasilevskiy. Semicond. Sci. Technol., **25**, 085 008 (2010).

Редактор Т.А. Полянская

## Structure, composition, energy spectrum of InGaAs/GaAs tunnel-coupled quantum wells

S.V. Khazanova, N.V. Baidus'<sup>\*</sup>, B.N. Zvonkov<sup>\*</sup>,  
D.A. Pavlov, N.V. Malekhonova, V.E. Degtyarev,  
D.S. Smotrin, A.I. Bobrov

Lobachevsky State University,  
603950 Nizhny Novgorod, Russia

<sup>\*</sup> Physical-Technical Research Institute  
of Lobachevsky State University,  
603950 Nizhny Novgorod, Russia

**Abstract** In this work we investigate the tunnel-coupled quantum well heterostructures both experimentally and theoretically. Distribution of InGaAs alloy composition was obtained by means transmission electron microscopy method and X-ray energy dispersive spectrometry. Photoconductivity and photoluminescence spectra were measured experimentally. Numerical simulation of growth process was carried out. Self-consistent solution of the Schrödinger and Poisson equations is used for calculation of the real energy quantum spectrum. Results of the electron microscopy, theoretical results and spectroscopy data are compared. Good agreement of theoretical and experimental results is observed. Thus, we demonstrate complex control method of structure properties for growth parameters optimization.