# Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт сверхвысокочастотной полупроводниковой электроники Российской академии наук

на правах рукописи

Ahred

Клочков Алексей Николаевич

Электронный спектр в модулированно-легированных гетероструктурах InGaAs/InAlAs на подложках GaAs и InP

01.04.10 – Физика полупроводников Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Научный руководитель: д.ф.-м.н. Галиев Галиб Бариевич

# Оглавление

Введение
Глава 1. Обзор работ в области электронных свойств модулированно-легированных
гетероструктур InAlAs/InGaAs/InAlAs10
1.1 Двумерный электронный газ в полупроводниковых модулированно-легированных
гетероструктурах10
1.2 Полупроводниковые HEMT-гетероструктуры на подложках GaAs и InP13
1.3 Фотолюминесцентная спектроскопия гетероструктур с квантовыми ямами
InGaAs/InAlAs21
Выводы
Глава 2. Экспериментальные и теоретические методы исследования
2.1 Молекулярно-лучевая эпитаксия
2.1.1 Молекулярно-лучевая эпитаксия твердых растворов AlGaInAs33
2.1.2 Установка молекулярно-лучевой эпитаксии «ЦНА-24»
2.2 Методика определения концентрации и подвижности электронов41
2.3 Спектроскопия фотолюминесценции
2.4 Просвечивающая электронная микроскопия
2.5 Моделирование зонной структуры полупроводниковых гетероструктур47
2.5.1 Моделирование зонной структуры полупроводниковых гетероструктур в
приближении огибающей волной функции48
2.5.2 Зонная структура тройных твердых растворов InGaAs и InAlAs и
гетероструктур на их основе56
Глава 3. Расчет электронного спектра модулированно-легированных гетероструктур
InAlAs/InGaAs
3.1 Влияние концентрации легирования на электронный спектр в квантовых ямах
$In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$
$3.2~{ m B}$ лияние толщины квантовой ямы ${ m In}_{0.53}{ m Ga}_{0.47}{ m As}/{ m In}_{0.52}{ m Al}_{0.48}{ m As}$ на спектр двумерного
электронного газа
$3.3~{ m B}$ лияние состава квантовой ямы ${ m In}_x{ m Ga}_{1-x}{ m As}/{ m In}_{0.52}{ m Al}_{0.48}{ m As}$ на электронный спектр72
$3.4$ Влияние толщины спейсера на зонную структуру $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ 73
$3.5~{\rm B}$ лияние толщины барьера на зонную структуру ${\rm In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As}$ 74
$3.6~{ m B}$ лияние содержания In в барьере на зонные диаграммы ${ m In}_{0.53}{ m Ga}_{0.47}{ m As}/{ m In}_y{ m Al}_{1-y}{ m As}$ 76
Выводы77
Глава 4. Спектроскопия фотолюминесценции модулированно-легированных
наногетероструктур InGaAs/InAlAs с напряженными вставками InAs и GaAs79

4.1 Наногетероструктуры InGaAs/InAlAs на подложках InP со вставками InAs разл	ІИЧНОЙ
толщины в квантовой яме	79
4.1.1 Структура и условия получения экспериментальных образцов	79
4.1.2 Электронная микроскопия	81
4.1.3 Спектроскопия фотолюминесценции наногетероструктур InGaAs/InAlAs	co
вставками InAs различной толщины	85
4.1.4 Моделирование зонной структуры квантовых ям InGaAs/InAlAs со встав	ками
InAs различной толщины	90
4.2 Наногетероструктуры InGaAs/InAlAs на подложках InP с парными вставками	
InAs и/или GaAs в квантовой яме	95
4.2.1 Структура и условия получения экспериментальных образцов	95
4.2.2 Электронная микроскопия	97
4.2.3 Спектроскопия фотолюминесценции наногетероструктур InGaAs/InAlAs	на
подложках InP с парными вставками InAs и/или GaAs	100
4.2.4 Моделирование зонной структуры квантовых ям InGaAs/InAlAs с парны	МИ
вставками InAs и/или GaAs	105
4.2.5 Обсуждение результатов	110
Выводы	112
Глава 5. Спектроскопия фотолюминесценции метаморфных модулированно-	
легированных гетероструктур $In_xGa_{1-x}As/In_yAl_{1-y}As$	113
5.1 Метаморфные HEMT-гетероструктуры $In_xGa_{1-x}As/In_xAl_{1-x}As$ на подложках $Ga_{1-x}As$	As
с содержанием индия $x \approx 0.7$ в квантовой яме	114
5.1.1 Структура и условия получения образцов	114
5.1.2 Спектроскопия фотолюминесценции метаморфные гетероструктур	
$In_xGa_{1-x}As$ / $In_xAl_{1-x}As$ с содержанием индия $x\approx 0.7$ в квантовой яме	116
5.2 Метаморфные HEMT-гетероструктуры $In_xGa_{1-x}As/In_xAl_{1-x}As$ на подложках $Ga_{1-x}As$	As
с содержанием индия $x \approx 0.4$ в квантовой яме	122
5.2.1 Структура и условия получения образцов	122
5.2.2 Спектроскопия фотолюминесценции метаморфных НЕМТ-гетерострукту	ур
$In_xGa_{1-x}As/In_xAl_{1-x}As$ на подложках GaAs с содержанием индия $x\approx 0.4$	125
Выводы	130
Заключение	131
Список сокращений и условных обозначений	133
Список литературы	134

### Введение

Актуальность темы исследования. Модулированно-легированные гетероструктуры (МЛГ) с квантовой ямой (КЯ) InGaAs/InAlAs широко применяются в микроэлектронике в качестве базового материала для сверхвысокочастотных полевых транзисторов для приема и передачи электромагнитных волн (50 – 1000 ГГц) [1,2] в приложениях широкополосной беспроводной связи (спутниковой, мобильной, специальной), радиолокации, а также в вычислительных логических схемах [3]. В последнее время широко исследуются возможность испускания и детектирования терагерцового излучения в МЛГ при помощи возбуждения плазменных волн в ДЭГ [4,5]. Использование МЛГ InGaAs/InAlAs обусловлено высокими достижимыми концентрацией и подвижностью электронов за счет пространственного разделения двумерного электронного газа (ДЭГ), локализованного в КЯ InGaAs/InAlAs, и ионов легирующей примеси.

Благодаря прогрессу технологии эпитаксиального роста стремительно появляются новые типы полупроводниковых гетероструктур и проводятся модификации существующих конструкций. Необходимость оптимизации электрофизических параметров гетероструктур обусловлена задачами повышения частотных характеристик полевых транзисторов. Такая оптимизация затрагивает решение ряда фундаментальных задач, связанных с исследованием энергетического спектра и явлений переноса электронов в сложных квантовых наносистемах, состоящих из различных полупроводниковых материалов. Так, широко исследуется возможность увеличения транспортных свойств ДЭГ путем зонной инженерии электронных состояний в составных КЯ (СКЯ) с использованием тонких функциональных слоев-вставок, например, InAs или GaAs. Такие слои создают потенциальные ямы или потенциальные барьеры для движения носителей заряда в СКЯ и могут быть использованы для управления областью их локализации, конструирования энергетического спектра и изменения эффективной массы. Например, счет локализации ДЭГ внутри нанометровых слоев InAs КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  добиваются повышения подвижности и дрейфовой скорости электронов. Несмотря на разнообразие работ по оптимизации электронного транспорта в СКЯ InAlAs/InGaAs, данные о модификации спектра электронных и дырочных состояний в СКЯ при введении дополнительных напряженных слоев довольно скудны. Практически отсутствуют исследования энергетического спектра и оптических свойств МЛГ с КЯ InGaAs/InAlAs, содержащих тонкие слои InAs и GaAs, а также влияния упругих напряжений в этих слоях на состояния электронов и дырок.

Механические деформации ограничивают возможный диапазон состава КЯ  $\ln_x Ga_{1-x} As$  в псевдоморфных МЛГ:  $x \approx 0-0.25$  для структур на подложках GaAs, и x = 0.53-0.75 для

структур на InP. Необходимость преодоления этого ограничения привела к разработке метаморфных гетероструктур InGaAs/InAlAs на подложках GaAs. В таких структурах между подложкой и КЯ выращивается толстый буферный слой InAlAs с постепенно изменяющимся составом. Метаморфный буфер (МБ) обеспечивает согласование параметров решетки подложки и активной области и позволяет получать ненапряженную КЯ In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As с произвольным наперед заданным составом. Наиболее интересными являются два диапазона составов х. При х  $\sim 0.35 - 0.4$  на гетерогранице  $In_xGa_{1-x}As/In_xAl_{1-x}As$  разрыв зоны проводимости максимален (0.7) эВ), что позволяет повысить плотность ДЭГ в КЯ. Исследование гетероструктур с содержанием индия x > 0.7 обусловлено стремлением повышения электронной подвижности и дрейфовой Оптические свойства метаморфных структур InGaAs/InAlAs скорости. исследованы недостаточно подробно, в частности, не определено влияние профиля химического состава в МБ на форму спектров фотолюминесценции (ФЛ).

Вместе с расширением класса полупроводниковых гетероструктур возникают задачи по изучению их физических свойств во взаимосвязи с технологическими условиями получения. Транспортные свойства ДЭГ в КЯ определяются формой волновых функций (ВФ) и заполнением электронных состояний. Поэтому исследование электронного спектра МЛГ как путем расчета зонной структуры, так и измерения оптических свойств, является актуальной задачей. Анализ спектров ФЛ позволяет получить сведения о фундаментальных свойствах материалов — зонной структуре, энергиях электронных состояний и их заполнении. Также метод ФЛ может использоваться в технологии гетероструктур для контроля состава и толщин слоев. Поэтому в настоящей работе была поставлена задача исследования спектров ФЛ новых типов МЛГ InGaAs/InAlAs на подложках GaAs и InP одновременно с контролем их структурных и электрофизических параметров.

**Целью** работы является установление влияния на электронный спектр и фотолюминесцентные свойства вариации геометрии и состава слоев МЛГ  $In_xGa_{1-x}As/In_yAl_{1-y}As$  на подложках GaAs и InP, в том числе влияния введения в КЯ нанометровых слоев InAs и GaAs и изменения профиля химического состава в МБ.

Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

Проведение расчета спектра электронов и дырок, энергий межзонных оптических переходов, зонной структуры, распределения электронной плотности в МЛГ InGaAs/InAlAs в зависимости от толщины и состава слоев КЯ, легирования, а также при введении в КЯ слоев InAs и GaAs;

Выращивание и исследование электронных свойств МЛГ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  на подложках InP, содержащих в KЯ центральную вставку InAs различной толщины;

Выращивание и исследование электронных свойств МЛГ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  на подложках InP, содержащих в КЯ парные вставки InAs и/или GaAs;

Выращивание и исследование спектров ФЛ метаморфных МЛГ  $In_xGa_{1-x}As/In_xAl_{1-x}As$  (x = 0.38 и x = 0.7) с различным профилем химического состава в МБ.

Научная новизна работы заключается в том, что в ней впервые:

- экспериментально и теоретически установлено влияние введения в КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  слоев-вставок InAs и GaAs на положение и форму спектров  $\Phi \Pi$ ;
- обнаружен монотонный сдвиг максимума ФЛ от КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  при увеличении толщины центральной вставки InAs;
- теоретически предсказано инверсное расположение подзон легких и тяжелых дырок в МЛГ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ , содержащих вставки GaAs;
- экспериментально обнаружено и объяснено сильное увеличение интенсивности и смещение в сторону меньших энергий полосы  $\Phi \Pi$  от гетерограницы  $In_{0.52}Al_{0.48}As/InP$  при увеличении длительности и температуры отжига подложки InP в потоке молекул  $As_4$ ;
- обнаружена линейная зависимость полуширины пика  $\Phi$ Л КЯ  $In_{0.7}Ga_{0.3}As/In_{0.7}Al_{0.3}As$  от слоевой концентрации электронов;
- экспериментально установлено влияние профиля химического состава в МБ (ступенчатого, линейного, содержащего сверхрешетки и инверсные ступени) на форму спектров ФЛ МЛГ InGaAs/InAlAs на подложках GaAs.

Научная и практическая значимость работы. Полученные результаты расширяют знания об электронном спектре и оптических свойствах МЛГ с КЯ InGaAs/InAlAs и зависимость этих свойств от конструкции и технологических условий получения. Данные гетероструктуры широко применяются в качестве базового материала для быстродействующих полевых транзисторов. Представленные в работе результаты важны для решения технологических задач по разработке новых, а также оптимизации и улучшению существующих приборов на основе структур InGaAs/InAlAs.

Проведен систематический расчет зависимости электронного спектра и энергий межзонных оптических переходов в МЛГ InGaAs/InAlAs от вариации геометрии и состава слоев гетероструктуры, а также способа легирования. Построены номограммы зависимости энергий межзонных переходов от концентрации ДЭГ  $n_S$  в КЯ In $_{0.53}$ Ga $_{0.47}$ As/In $_{0.52}$ Al $_{0.48}$ As различной толщины.

Предложен способ управления спектром дырок в наногетероструктурах с КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  при помощи слоев-вставок GaAs и InAs. Он может быть использован при разработке активной области гетероструктур для светодиодов, лазерных диодов,

фотодетекторов, квантово-каскадных лазеров, резонансно-теннельных приборов на основе КЯ InGaAs/InAlAs.

Результаты работы были использованы при выполнении прикладных научных исследований "Разработка наногетероструктур на подложках фосфида индия для приборов СВЧ наноэлектроники (диапазон 100 − 300 ГГц)" (соглашение с Минобрнауки России №14.604.21.0003 от 17 июня 2014 г.), а также научно-исследовательской работы "Разработка технологии ихготовления метаморфных наногетероструктур InAlAs/InGaAs/GaAs для диапазона частот 60-80 ГГц" (государственный контракт с Минобрнауки России №16.513.11.3113 от 12 октября 2011 г.).

#### Положения, выносимые на защиту:

- 1. В случае отсутствия параллельной проводимости по легирующему слою энергии межзонных оптических переходов в односторонне-легированных КЯ  $In_xGa_{1-x}As/In_yAl_{1-y}As$  (x = 0.53 0.7, y = 0.4 0.52) полностью определяются плотностью ДЭГ  $n_S$ , толщиной КЯ и содержанием индия в КЯ.
- 2. Положение пика ФЛ от КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ , содержащей в центре вставку InAs, смещается в сторону меньших энергий при увеличении толщины  $L_{InAs}$  слоя InAs в диапазоне от 1.7 до 3.0 нм. Интенсивность соответствующего оптического перехода и подвижность электронов в КЯ немонотонно зависят от  $L_{InAs}$  и максимальны при  $L_{InAs} = 2.1$  нм.
- 3. Изменение оптических свойств (формы, количества и положения пиков в спектрах  $\Phi$ Л) КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  при введении слоев GaAs и InAs обусловлено влиянием вставок InAs и GaAs на энергию и пространственную конфигурацию ВФ легких и тяжелых дырок.
- 4. Интенсивность полосы  $\Phi \Pi$  от гетерограницы  $In_{0.52}Al_{0.48}As/InP$  возрастает, а положение смещается в сторону меньших энергий при увеличении длительности и температуры предростового отжига подложки InP в потоке молекул  $As_4$ . Это обусловлено образованием на поверхности подложки InP переходного слоя-KЯ в результате замещения атомов P атомами As при высокотемпературном отжиге.
- 5. В спектрах ФЛ метаморфных МЛГ InGaAs/InAlAs обнаружены две полосы, связанные с рекомбинацией носителей заряда в КЯ и в МБ. Полуширина пика ФЛ от КЯ  $In_{0.7}Ga_{0.3}As/In_{0.7}Al_{0.3}As$  линейно зависит от слоевой концентрации ДЭГ. Форма и положение полосы от МБ определяются профилем химического состава в нем.

**Личный вклад соискателя.** Соискатель выполнил теоретические расчеты электронного спектра гетероструктур, провел анализ и интерпретацию спектров фотолюминесценции исследованных гетероструктур. Он также принимал участие при планировании и проведении экспериментальных работ по эпитаксиальному росту гетероструктур в лаборатории

исследования процессов формирования низко-размерных электронных систем в наногетероструктурах соединений  $A^3B^5$  ИСВЧПЭ РАН (зав. лаб. д.ф.-м.н. Г.Б. Галиев), определению концентрации и подвижности электронов, измерению спектров ФЛ. Электронномикроскопические исследования гетероструктур были проведены в НИЦ «Курчатовский институт» Васильевым А.Л.

Достоверность результатов работы обусловлена тем, что исследуемые гетероструктуры были получены методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) в известной лаборатории, в которой выращиваются МЛГ с электрофизическими параметрами, соответствующими мировому уровню. Для характеризации структур использовались общепризнанные прецизионные методы исследования — измерения эффекта Холла и электропроводности, спектроскопии ФЛ, просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Достоверность выводов следует из согласия экспериментальных результатов с теоретическими расчетами электронного спектра и с современными знаниями.

Апробация результатов Результаты работы были представлены на следующих международных и российских конференциях: 21-st, 22-nd International symposium "Nanostructures: Physics and Technology" (Санкт-Петербург, 2013, 2014); XI Российская конференция по физике полупроводников (Санкт-Петербург, 2013); XIX международный симпозиум "Нанофизика и наноэлектроника" (Нижний Новгород, 2015); 3-я, 5-я и 6-я научнопрактическая конференция по физике и технологии наногетероструктурной СВЧ электроники «Мокеровские чтения» (Москва, НИЯУ МИФИ, 2013, 2014); Научная сессия НИЯУ МИФИ (Москва, 2010); XVII международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2010» (Москва, 2010).

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано 13 работ, из них 7 статей - в журналах, входящих в Перечень изданий, рекомендованных ВАК Минобрнауки России, 1 статья — в зарубежном рецензируемом журнале, реферируемом в базах данных Scopus и Web of Science, 5 работ - в сборниках трудов всероссийских и международных конференций. Общий объем опубликованных по теме диссертации работ составил 70 мп. стр.

**Объем и структура диссертации.** Диссертация содержит 5 глав, 153 страницы, 61 рисунок, 22 таблицы, список цитируемой литературы из 244 источников. Работа состоит из введения, 5 глав основного содержания и заключения.

В главе 1 приведен обзор научной литературы в области электронных свойств МЛГ InAlAs/InGaAs/InAlAs. Рассмотрены особенности строения (состава и толщин слоев) МЛГ  $In_xGa_{1-x}As/In_xAl_{1-x}As$  (x=0.4-0.7) на подложках GaAs и InP, данные об электронном энергетическом спектре в КЯ и особенности спектров ФЛ КЯ InGaAs/InAlAs, содержащих ДЭГ.

В главе 2 приведено описание экспериментальных и теоретических методов исследования, применяемых в работе. Экспериментальные образцы изготавливались методом МЛЭ. Для характеризации образцов применялись следующие экспериментальные методы исследования: измерение удельного сопротивления и коэффициента Холла, спектроскопия ФЛ, просвечивающая электронная микроскопия. Зонная структуры МЛГ моделировалась путем самосогласованного решения системы уравнений Шредингера-Пуассона.

Глава 3 посвящена моделированию зонной структуры КЯ  $In_xGa_{1-x}As/In_yAl_{1-y}As$  (x = 0.53 - 0.7, y = 0.4 - 0.52) с ДЭГ. В ней описаны результаты расчета энергий и ВФ электронов и дырок, концентрации электронов, энергий межзонных переходов и интегралов перекрытия ВФ при вариации конструкции односторонне-легированных гетероструктур  $In_xGa_{1-x}As/In_yAl_{1-y}As$ . Показано, что основными параметрами, определяющими энергии межзонных переходов в КЯ, являются толщина КЯ и содержание  $In B K In_xGa_{1-x}As$ , а также концентрация ДЭГ.

В главе 4 представлены результаты экспериментального и теоретического исследования влияния тонких слоев-вставок InAs и GaAs в КЯ на электронный спектр и структурные свойства МДГ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  на подложках InP.

В главе 5 представлены результаты исследования электронных свойств метаморфных гетероструктур  $In_xGa_{1-x}As/In_xAl_{1-x}As$  на подложках GaAs с содержанием индия в активной области x = 0.7 и x = 0.38.

В заключении излагаются основные выводы работы.

# Глава 1. Обзор работ в области электронных свойств модулированнолегированных гетероструктур InAlAs/InGaAs/InAlAs

## 1.1 Двумерный электронный газ в полупроводниковых модулированнолегированных гетероструктурах

Развитие технологии эпитаксиального роста в последние десятилетия XX века привело к возможности получения многослойных структур из различных полупроводников (гетероструктур) и управления толщинами слоев с точностью до атомного монослоя. Это стимулировало разработку разнообразных по конструкции и составу гетероструктур, в которых было открыто значительное число фундаментальных физических явлений, не наблюдавшихся ранее в объемных кристаллических материалах: явление резонансного туннелирования [6], образование минизон в электронном спектре сверхрешеток [7], явление размерного квантования в тонких полупроводникых слоях [8], дробный квантовый эффект Холла [9].

Гетероструктуры позволили решить общую проблему управления фундаментальными свойствами полупроводниковых материалов и устройств на их основе, такими как ширина запрещенной зоны  $E_g$ , подвижность  $\mu$  и эффективная масса носителей заряда  $m^*$ , электронный энергетический спектр, показатель преломления. Значительный мировой вклад в развитие физики и технологии гетероструктур внесли работы академика Ж.И. Алферова [10]. На сегодняшний день практически во всех областях твердотельной электроники гетероструктуры используются в качестве базового материала для таких приборов как лазеры, светодиоды, биполярные гетероструктурные транзисторы, полевые транзисторы, фотодетекторы.

Составной частью любой гетероструктуры является контакт двух различных полупроводников, называемый гетеропереходом. Рассмотрим образование гетероперехода на примере гетеропары твердых растворов  $n^+$ -In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As/In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As [11]. На рисунке 1.1 (*a*) представлена зонная структура полупроводников In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As и In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As. При образовании гетероперехода, согласно модели, предложенной Андерсоном [ 12 ], на гетерогранице происходит разрыв зон, который равен для зоны проводимости  $E_C$  и валентной зоны  $E_V$ :

$$\Delta E_{\rm C} = \gamma_1 - \gamma_2,\tag{1.1}$$

$$\Delta E_{\rm V} = \Delta E_{\rm g} - \Delta E_{\rm C},\tag{1.2}$$

где  $E_{\rm g}$  - ширина запрещенной зоны,  $E_{\rm F}$  - положение уровня Ферми,  $\chi$  - энергия электронного сродства, которая определяется как энергия, необходимая для переноса электрона с состояния на краю зоны проводимости в свободное пространство.

В легированном донорами  $n^+$ -In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As уровень Ферми расположен вблизи края зоны проводимости, а в нелегированном In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As — в центре запрещенной зоны. При образовании гетероперехода положение уровня Ферми по всей системе в состоянии равновесия должно быть постоянным, поэтому происходит пространственное перераспределение носителей заряда. Энергетическое положение уровней доноров в легированном In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As выше, чем край зоны проводимости в In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As, поэтому часть электронов с этих уровней диффундирует в In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As. Пространственный заряд положительно заряженных доноров и электронов создает электрическое поле, которое формирует квазитреугольную потенциальную яму вблизи гетерограницы [13] и приводит к изгибу зон в полупроводниках (рисунок 1.1  $\delta$ ).

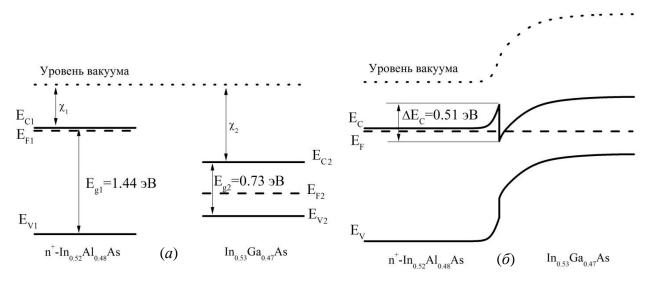


Рисунок 1.1 - Схема образования гетероперехода  $n^+$ -In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As/In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As. Зонная диаграмма: *а*) изолированных In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As и  $n^+$ -In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As и  $\delta$ ) гетероперехода.

Электроны, перешедшие в In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As, локализуются вблизи гетерограницы из-за притягивающего электростатического поля доноров и образуют двумерный электронный газ (ДЭГ). ДЭГ - это электронный газ, движение которого ограничено в одном направлении энергетической потенциальной ямой и свободно в двух перпендикулярных направлениях. Ограничивающий движение ДЭГ потенциал называется квантовой ямой (КЯ). В полупроводниках треугольная КЯ может быть создана встроенным электрическим полем в области гетероперехода или прикладыванием потенциала к поверхности полупроводника (эффект поля). Если вырастить последовательно два гетероперехода – прямой и обратный, то образуется двойная гетероструктура (ДГС), в которой ограничивающий движение электронов в поперечном направлении потенциал является прямоугольным.

Гетеропереходы и ДГС принято классифицировать по знаку разрывов зон  $\Delta E_{\rm C}$  и  $\Delta E_{\rm v}$  на гетерогранице [14]. На рисунке 1.2 схематически представлены три типа ДГС, образованных из полупроводников A и B с различной шириной запрещенной зоны ( $E_{\rm gB} > E_{\rm gA}$ ). В

гетероструктурах типа I разрывы в зоне проводимости  $\Delta E_{\rm C}$  и в валентной зоне  $\Delta E_{\rm v}$  имеют противоположные знаки, запрещенная зона  $E_{\rm gB}$  полностью перекрывает  $E_{\rm gA}$ . В ДГС типа I ограничение и электронов, и дырок происходит внутри слоев более узкозонного полупроводника А. Широкозонный полупроводник В в этом случае называют барьером. Примеры гетеросистем типа I - GaAs/Al $_{\rm x}$ Ga $_{1-x}$ As, In $_{\rm x}$ Ga $_{1-x}$ As/GaAs, In $_{0.53}$ Ga $_{0.47}$ As/In $_{0.52}$ Al $_{0.48}$ As. В гетеропереходах типа II модуляция краев зон  $\Delta E_{\rm C}$  и  $\Delta E_{\rm v}$  имеет одинаковый знак, и запрещенные зоны полупроводников перекрываются частично (ступенчатый ход зон типа IIA), либо не перекрываются вообще (тип IIB). В гетероструктурах типа II локализация электронов происходит в одном слое, а дырок - в другом. Примерами гетеросистем типа IIA являются In $_{0.52}$ Al $_{0.48}$ As/InP, а гетеросистем типа IIB - InAs/GaSb. Гетероструктуры, содержащие бесщелевые полупроводники ( $E_{\rm g}=0$  эВ), например HgTe, относят к типу III.

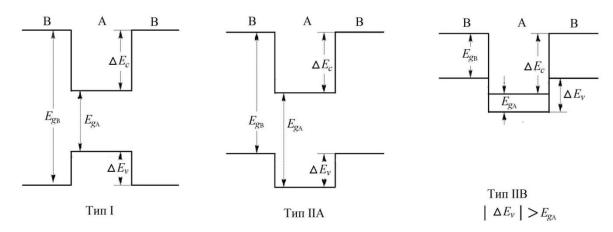


Рисунок 1.2 - Схема взаимного расположения краев зон в различных типах ДГС, образованных из двух полупроводников A и B.

В гетероструктурах, представляющих собой совокупность плоских параллельных слоев, в двух продольных направлениях X и Y (параллельно границам слоев) вследствие трансляционной инвариантности движение электронов и дырок свободно. В поперечном направлении Z из-за наличия гетеропереходов и встроенного электрического поля существует ограничивающий движение носителей заряда потенциал, который приводит к квантованию состояний электронов и дырок [15]. В одномерном ограничивающем потенциале существует по крайней мере одно локализованное состояние [16]. Энергетический спектр носителей заряда является квантованным (дискретным) для движения перпендикулярно слоям и непрерывным для движения в двух других направлениях, то есть носит квазидвумерный характер. Если расстояние между уровнями квантования превышает тепловую энергию kT, то квантовые эффекты могут играть существенную роль и должны учитываться при рассмотрении свойств гетероструктур. Энергетический спектр электронов в КЯ состоит из набора двумерных подзон

размерного квантования  $E_i$  ( $k_x$ ,  $k_y$ ), каждая из которых содержит следующие значения энергии для всевозможных значений квазиволновых векторов  $k_x$  и  $k_y$ :

$$E_{i}(k_{x},k_{y}) = E_{i} + \frac{\hbar^{2}(k_{x}^{2} + k_{y}^{2})}{2m_{\parallel i}^{*}},$$
(1.3)

где  $E_i$  — энергетическое положение уровней квантования в КЯ в поперечном направлении Z, i=1,2,3... — номер уровня энергии,  $\hbar\approx 1.055\cdot 10^{-34}$  Дж·с — приведенная постоянная Планка,  $m_{\parallel i}^*$  — продольная эффективная масса электронов i-й подзоны в плоскости слоев гетероструктуры XY.

Каждая подзона для закона дисперсии (1.3) дает постоянный, не зависящий от энергии, вклад в плотность электронных состояний системы, равный  $m_{\parallel i}^{\phantom{\parallel i}}/\pi\hbar^2$ . При наличии нескольких квантовых уровней в двумерной системе плотность состояний имеет ступенчатый вид:

$$g_{2D}(E) = \sum_{i} \frac{m_{\parallel i}^{*}}{\pi \hbar^{2}} \cdot \Theta(E - E_{i}), \qquad (1.4)$$

где  $\Theta(E)$  — ступенчатая функция Хевисайда. В состоянии термодинамического равновесия вероятность заполнения электронных состояний описывается функцией распределения Ферми-Дирака. Заполнение электронных состояний различных подзон и двумерная концентрация электронов  $n_s$  характеризуются положением уровней  $E_i$  по отношению к уровню Ферми  $E_F$ :

$$n_{S} = \int_{-\infty}^{+\infty} g_{2D}(E) \frac{1}{1 + e^{(E - E_{F})/kT}} dE = kT \sum_{i} \frac{m_{\parallel i}^{*}}{\pi \hbar^{2}} \ln \left( 1 + \frac{E_{F} - E_{i}}{kT} \right). \tag{1.5}$$

Суммирование в выражении (1.5) идет по номеру подзоны, и каждое i-е слагаемое этой суммы пропорционально плотности электронов в i-й подзоне размерного квантования  $n_i$ . Если число заполненных энергетических подзон в ДЭГ превышает одну, то говорят о квазидвумерном электронном газе. Если уровень Ферми находится существенно выше основного квантового уровня ( $E_F$  -  $E_1$ ) >> kT, то ДЭГ в такой системе называют вырожденным и его двумерная плотность приблизительно равна:

$$n_S \approx \sum_i \frac{m_{\parallel i}^*}{\pi \hbar^2} (E_F - E_i) \Theta(E_F - E_i). \tag{1.6}$$

## 1.2 Полупроводниковые HEMT-гетероструктуры на подложках GaAs и InP

Для создания вырожденного ДЭГ полупроводниковые наногетероструктуры легируют. Широко применяется технология модулированного легирования гетероструктур [ 17 ], отличающаяся от объемного легирования тем, что атомы примеси вводят в области барьеров, а узкозонные области КЯ преднамеренно оставляют нелегированными. Использование эпитаксиальных методов роста позволяет создавать сложные профили распределения легирующих примесей по слоям гетероструктуры. Наиболее часто используемыми профилями

являются однородное легирование, при котором атомы примеси равномерно распределены по слою полупроводника заданной толщины, и дельта-легирование, при котором атомы легирующей примеси вводят в тонкий, порядка нескольких монослоев, слой гетероструктуры.

Ионизация мелких примесей в случае модулированного легирования происходит не за счет тепловой активации в зону проводимости, как в объемных легированных полупроводниках, а вследствие перехода электронов с примесей в нелегированные узкозонные слои. На рисунке 1.3 проиллюстрировано образование ДЭГ в модулированно-легированной ДГС  $n\text{-}In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As/n\text{-}In_{0.52}Al_{0.48}As$ . Электроны из легированных барьерных областей  $In_{0.52}Al_{0.48}As$  локализуются в слое  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ , формируя отрицательную область пространственного заряда (ОПЗ). Слоевая концентрация ДЭГ  $n_S$  определяется плотностью легирующих примесей и величиной разрыва зоны проводимости  $\Delta E_C$  на гетерограницах, поэтому  $n_S$  практически не зависит от температуры в широком диапазоне от  $T \approx 0$  K до T > 300 K.

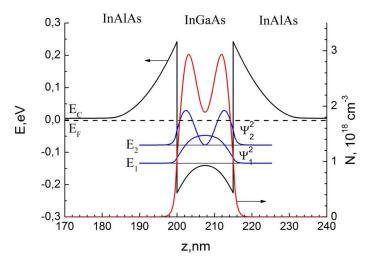


Рисунок 1.3 – Профиль зоны проводимости  $E_{\rm C}$ , квадраты волновых функций  $\Psi_i^2(z)$  и распределение плотности электронов N в МЛГ n-In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As/In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As/n-In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As.

Основным преимуществом модулированного легирования перед объемным является снижение примесного рассеяния из-за пространственного разделения электронов в КЯ и ионов примесей в барьерах. Из рисунка 1.3 видно, что за счет туннельного эффекта хвосты ВФ электронов частично проникают в барьеры  $In_{0.52}Al_{0.48}As$ . Для увеличения подвижности носителей заряда вводятся нелегированные прослойки (спейсеры), разделяющие КЯ и легированные области барьеров. ВФ электронов затухают в спейсере толщиной несколько нанометров, и почти не проникают в области, содержащие примеси.

МЛГ с ДЭГ используются в качестве базового материала для полевых транзисторов с барьером Шоттки, называемых НЕМТ (high electron mobility transistor – транзистор с высокой подвижностью электронов). На рисунке 1.4 представлена схема НЕМТ. В полевом транзисторе

электрический ток протекает по каналу (области гетероструктуры с высокой проводимостью) при прикладывании напряжения между истоком и стоком. Контакты между НЕМТ гетероструктурой и металлами истока и стока являются омическими, т.е. являются невыпрямляющими и обладают низким сопротивлением. При заданном напряжении исток-сток концентрация электронов в канале и величина тока контролируются напряжением, приложенным к затвору  $V_g$ . В области контакта НЕМТ гетероструктуры и металла затвора формируется барьер Шоттки. При нулевом  $V_g$  канал заполнен высокой плотностью ДЭГ, определяемой легированием. При прикладывании отрицательного напряжения к затвору увеличивается высота барьера Шоттки под затвором, что приводит к истощению ДЭГ в канале и уменьшает его проводимость.

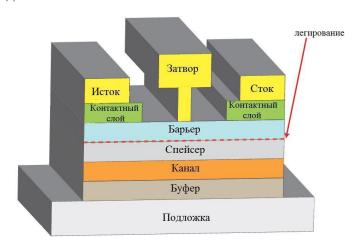


Рисунок 1.4 – Схема НЕМТ

НЕМТ гетероструктуры состоят из нескольких полупроводниковых слоев, имеющих функциональное или технологическое значение. Буферный слой, являющийся наиболее толстым (>300 нм) по сравнению с остальными слоями НЕМТ гетероструктуры, выращивается на подложке и обеспечивает гладкую, бездефектную поверхность для выращивания активных слоев гетероструктуры, препятствует проникновению примесей, дефектов из подложки в вышележащие слои, обеспечивает согласование параметра решетки подложки и канала. Также буфер формирует нижний потенциальный барьер для электронов в КЯ. Канал гетероструктуры - модулированно-легированная КЯ, состоящая из узкозонного полупроводника, с высокой концентрацией и подвижностью электронов. Легирование обеспечивает заполнение КЯ носителями заряда и обычно осуществляется в виде дельта-легирования. Нелегированный спейсер выращивается увеличения подвижности носителей ДЛЯ заряда канале. Нелегированный барьерный слой – широкозонный полупроводник, который, во-первых, формирует потенциальный барьер для носителей заряда в КЯ и, во-вторых, обеспечивает формирование барьера Шоттки в контакте с металлом затвора. Контактный слой сильно легируется для создания омических контактов с низким сопротивлением стока и истока. При

изготовлении НЕМТ транзистора в области затвора контактный слой гетероструктуры вытравливается.

Развитие технологии НЕМТ происходило одновременно с совершенствованием методов эпитаксиального роста гетероструктур. Первые НЕМТ основывались на гетероструктурах  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ , в которых гетеропара полупроводников GaAs и  $Al_xGa_{1-x}As$  является решеточно согласованной [18]. Дальнейшее развитие НЕМТ связано с преодолением основного ограничения на конструкцию гетероструктур – различие параметров решетки активных слоев (КЯ и барьеров) и подложки. Поиски систем материалов, в которых величина разрыва зоны проводимости  $\Delta E_{\rm C}$  на гетерогранице больше, чем у GaAs/Al $_x$ Ga $_{1-x}$ As, привели к созданию гетероструктур с КЯ из узкозонного материала  $In_rGa_{1-r}As - псевдоморфных НЕМТ (РНЕМТ)$ гетероструктур AlGaAs/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs (0 < x < 0.25) [19] и псевдоморфных гетероструктур  $In_rGa_{1-x}As/In_0$  52 $Al_0$  48As (0.53 < x < 0.7) [20] на подложках InP. В РНЕМТ структурах тонкий слой КЯ  $In_xGa_{1-x}As$  (тоньше 20 нм) является упруго напряженным из-за различия параметра решетки InGaAs и подложки GaAs или InP. Величина упругих напряжений определяется рассогласованием параметров решеток эпитаксиального слоя  $a_0$  и подложки  $a_S$  (рисунок 1.5) [21], т.е. зависит от содержания индия x [22, 23]. Если толщина напряженного эпитаксиального слоя меньше так называемой критической толщины  $h_{\rm c}$ , то слой оказывается упруго напряженным (псевдоморфным). В этом случае деформации кубической решетки является тетрагональными: продольный параметр решетки (вдоль границы раздела) становится равным параметру решетки  $a_{\rm S}$ , а поперечный изменяется в зависимости от упругих констант слоя.

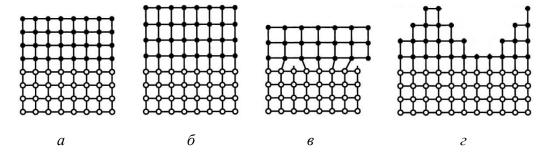


Рисунок 1.5 — Схема расположения атомов на гетерогранице: a) решеточно-согласованная гетероструктура  $a_{\rm S} = a_0$ ,  $\delta$ ) псевдоморфная гетероструктура  $a_{\rm S} < a_0$ ,  $\epsilon$ 0) релаксированная гетероструктура  $a_{\rm S} < a_0$ ,  $\epsilon$ 1) островковый рост  $a_{\rm S} < a_0$ .

После превышения критической толщины упругие деформации в эпитаксиальном слое начинают релаксировать либо путем образования структурных дефектов (как правило, дислокаций) [24], либо перехода к трехмерному (3D) росту островков. При релаксации путем образования дефектов кристаллическая структура приближается к недеформированному состоянию. Но высокая плотность структурных дефектов и увеличение шероховатости

гетерограниц при релаксации напряженного слоя негативно сказывается на транспортных характеристиках электронов в КЯ [25]. На рисунке 1.6 представлена зависимость критической толщины слоя  $In_xGa_{1-x}As$  на подложке InP [26] от состава x для температуры роста  $T_g = 525$  °C. При x < 80 % слой  $In_xGa_{1-x}As$  релаксирует при превышении критической толщины  $h_{MD}$  путем образования дислокаций несоответствия. При x > 80 % основной механизм релаксации напряжений изменяется — при некоторой толщине  $h_{3D}$  происходит образование островков  $In_xGa_{1-x}As$ , а при превышении толщины  $h_{ID}$  в островках образуются дислокации.

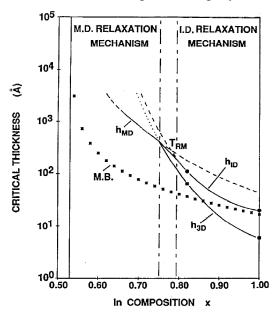


Рисунок 1.6 - Зависимость от состава слоя  $In_xGa_{1-x}As$  на подложке InP критических толщин для образования: дислокаций несоответствия  $(h_{MD})$ , трехмерных островков  $(h_{3D})$ , дислокаций при 3D росте  $(h_{1D})$ , в модели Мэтьюса-Блексли (М.В.) [24]. По данным работы [26]

В твердом растворе  $In_xGa_{1-x}As$  с ростом содержания  $In\ x$  монотонно уменьшается ширина запрещенной зоны, что приводит к повышению электронной концентрации за счет более жесткого захвата электронов в глубокой КЯ  $In_xGa_{1-x}As$ . Одновременно, это приводит к существенному повышению электронной подвижности за счет уменьшения эффективной массы электронов [27, 28]. Однако при возрастании x толщина напряженного слоя  $In_xGa_{1-x}As$  должна уменьшаться. Максимальное содержание  $In\$ ограничивается необходимостью предотвращения релаксации механических напряжений  $u\$ составляет  $x\ \sim\ 0.25\$ для PHEMT на  $In\$ GaAs. Необходимость повышения частотного диапазона полевых транзисторов привела  $In\$ с кя  $In\$ GaAs/ $In\$ AlAs на подложках фосфида индия  $In\$ C высоким содержанием индия  $In\$ C  $In\$ C In

гетероструктур связано с формированием композитных квантовых ям и применением функциональных слоев-вставок. Так, было обнаружено, что введение тонких слоев InAs в КЯ In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As/In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As приводит к увеличению дрейфовой скорости электронов на ~ 30 % [33], а также к увеличению подвижности ДЭГ по сравнению со структурой, содержащей однородную КЯ [34-38]. Выращивание таких гетероструктур связано с преодолением технологических трудностей, связанных с ростом сильно рассогласованных гетеропереходов и повышение параметров электронного транспорта наблюдается только при оптимальных условиях роста. Увеличение толщины слоя InAs ограничено критическим значением (образование дефектов или переход к 3D росту), превышение которого приводит к ухудшению качества вставки и всей активной области [39].

Увеличение  $\mu_e$  при введении нанослоя InAs происходит как за счет снижения эффективной массы электронов при увеличении содержания In в КЯ, за счет изменения механизмов рассеяния при вариации электронной ВФ и за счет ослабления межподзонного рассеяния в результате увеличения энергетического зазора между подзонами размерного квантования [40-42]. В работах [43,44], посвященных транспорту электронов в сильном электрическом поле, отмечается, что дополнительные слои InAs или GaAs в КЯ служат барьером для полярных оптических фононов, и позволяют изменять спектр, амплитуду и пространственную локализацию фононов, приводя при некоторых толщинах вставок к уменьшению электрон - фононного рассеяния. Таким образом, увеличение транспортных параметров ДЭГ может быть произведено путем измения конструкции КЯ с учетом ограничений, накладываемых механической деформацией слоев, а также с учетом влияния нановставок на электронную структуру КЯ (энергии и ВФ электронных подзон).

Наряду с РНЕМТ гетероструктурами широко исследуется технология получения метаморфных НЕМТ гетероструктур (МНЕМТ), которая сочетает преимущества, связанные с высоким содержанием In в КЯ и с использованием подложек GaAs (низкая цена и меньшая хрупость по сравнению с InP). Важнейшим элементом конструкции метаморфной гетероструктуры является МБ — толстый слой InAlAs с градиентом химического состава, который обеспечивает согласование параметров решетки подложки GaAs и активной области МНЕМТ гетероструктур [ 45 ], является виртуальной подложкой. МБ обеспечивает рост ненапряженной КЯ InGaAs/InAlAs с любым выбранным содержанием индия x от 0 до 1, что недоступно в РНЕМТ технологии. Релаксация упругих напряжений в МБ происходит за счет образования дислокаций, дефектов упаковки и других дефектов кристаллической решетки. Наиболее часто используемые конструкции МБ In $_x$ Al $_{1-x}$ As выращиваются с линейным [46] или ступенчатым [47] профилем состава толщиной 0.5—1 мкм. Для минимизации остаточных упругих деформаций в активной области гетероструктуры In $_x$ Ga $_{1-x}$ As в вершине МБ

обычно выращивается инверсная ступень — эпитаксиальный слой  $In_xAI_{1-x}As$  с плавно уменьшающимся содержанием x InAs на 0.04–0.08 [ 48 , 49 ]. Инверсная ступень обычно выращивается над напряжённым MБ с целью минимизации упругого напряжения в вышележащей активной области наногетероструктуры [50]. Для уменьшения концентрации дефектов в активной области и фильтрации прорастающих дислокаций в процессе эпитаксиального роста внутрь МБ могут быть внедрены сверхрешетки или инверсные ступени [ 51 ]. Особенностью МНЕМТ гетероструктур по сравнению с псевдоморфными гетероструктурами является сильная зависимость электрофизических параметров и структурного совершенства активной области от конструкции (толщины и профиля состава) МБ [49,52], а также от режимов эпитаксиального роста МБ [53].

Рассеяние оказывает существенное влияние на транспорт в гетероструктурах, так как приводит к случайным перескокам электронов между состояниями с различными модулями и направлениями квазиволнового вектора из-за столкновений с рассеивающими центрами. В результате устанавливается некоторая средняя скорость электронов, которая зависит линейно от внешнего электрического поля E (при невысоком поле) [54]:

$$v = -\frac{e\,\tau_{p}}{m_{e}^{*}}E = \mu_{e}E,\tag{1.7}$$

где  $e = 1.602 \cdot 10^{-19}$  Кл — модуль заряда электрона,  $\tau_p$  — время свободного пробега (среднее время релаксации импульса),  $m_e^*$  - эффективная масса электронов,  $\mu_e$  — низкополевая подвижность.

При оптимизации конструкции полупроводниковых гетероструктур InGaAs/InAlAs на подложках InP для СВЧ-приборов добиваются одновременно высокой концентрации электронов в канале и их подвижности. Основными механизмами рассеяния в МЛГ [55] являются рассеяние на фононах, на заряженных примесях, на фоновых примесях, на флуктуациях твердых растворов, на шероховатостях гетерограниц. В гетерострутурах InGaAs/InAlAs с содержанием  $In x \sim 0.5$  на подложках GaAs и InP при низких температурах лимитирующими механизмами рассеяния обычно являются рассеяние на флуктациях состава твердых растворов InGaAs и InAlAs и рассеяние на ионизированных примесях [56,57], но основной механизм рассеяния зависит от плотности ДЭГ, геометрии о состава слоев МЛГ, а также технологических условий роста. Лимитирующий механизм рассеяния определяется плотностью  $n_{\rm S}$  ДЭГ: при низкой  $n_{\rm S} \sim 10^{11}$  см<sup>-2</sup> подвижность определяется примесным рассеянием, а при  $n_{\rm S} \sim 10^{12}~{\rm cm}^{-2}$  — сплавным рассеянием, поскольку потенциал ионизированных примесей экранируется. Однако в МЛГ со спейсером толщиной меньше 5 нм основным механизмом рассеяния обычно является примесное [20]. В КЯ, содержащей только одну заполненную подзону размерного квантования, обычно наблюдается возрастание подвижности с увеличением концентрации  $n_S$  [58,59]. Это возрастание происходит до начала заполнения

второй квантовой подзоны, когда возникает межподзонное рассеяние и происходит резкий спад подвижности ДЭГ [60].

Полупроводниковые твердые растворы  $A^{III}B^V$  подвержены сплавному рассеянию. поскольку распределение атомов в них не являются строго периодическим. Локальные флуктуации состава твердых растворов приводят к изменению ширины запрещенной зоны полупроводников, к образованию напряжений, приводящих к появлению рассеивающего электроны потенциала. Сплавное рассеяние в МЛГ  $In_xAl_{1-x}As/In_xGa_{1-x}As$  максимально при  $x \approx$ 0.5 и ослабевает при увеличении или уменьшении x [61]. Рассеяние на заряженных примесях возникает в результате кулоновского взаимодействия электронов с электрическим полем ионизированных примесей. Как правило, темпы рассеяния увеличиваются с ростом концентрации примесей. В МЛГ электроны и область легирования разделены спейсером, что значительно снижает темпы рассеяния на удаленных примесях по сравнению с объемно легированными структурами. Рассеяние на дефектах связано с непреднамеренным образованием структурных нарушений в кристаллической решетке эпитаксиальных слоев гетероструктуры. Дефектность эпитаксиальной структуры зависит от технологических условий получения, наличия деформаций, а также структурного совершенства подложки. При соблюдении оптимальных контролируемых условий МЛЭ роста рассеяние на дефектах не является доминирующим механизмом. Среди различных типов МЛГ InAlAs/InGaAs рассеяние на дефектах является наиболее существенным для МНЕМТ гетероструктур, в которых структурные дефекты могут проникать из МБ в КЯ [61]. В гетероструктурах с композитными КЯ, состоящими из нескольких слоев, растет вероятность рассеяния электронов на шероховатостях гетерограниц, поскольку в области локализации ДЭГ увеличивается число интерфейсов [41,62].

Представление об основных механизмах рассеяниях, ограничивающих низкотемпературную подвижность, позволяет оптимизировать геометрию МЛГ для повышения транспортных характеристик. Темпы рассеяния электронов  $S(k_0, k')$  из состояния  $k_0$  в k' при движении в КЯ, согласно золотому правилу Ферми, определяются матричным элементом  $H_{k_0,k'}$  рассеивающего потенциала  $U_S(\vec{r})$  между состояниями  $k_0$  и k' [63]:

$$S_{k_0,k'} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| H_{k_0,k'} \right|^2 \delta(E(k') - E(k_0) - \Delta E) + \frac{2\pi}{\hbar} \left| H_{k_0,k'} \right|^2 \delta(E(k') - E(k_0) + \Delta E), \tag{1.8}$$

$$H_{k_0,k'} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \psi_{k_0}(\vec{r}) U_S(\vec{r}) \psi_{k'}(\vec{r}) d\vec{r}, \qquad (1.9)$$

где  $\delta(E)$  — дельта-функция, первое слагаемое в (1.7) описывает процессы с поглощением электроном порции энергии  $\Delta E$  при рассеянии, а второе слагаемое — с потерей энергии, для

упругих процессов рассеяния  $\Delta E=0$ ,  $\Omega$  – объем интегрирования,  $\psi_k(\vec{r})$  - ВФ электрона. Таким образом, темпы рассеяния определяются матричным элементом (1.9). Снижение рассеяния электронов на флуктуациях состава твердых растворов может быть произведено путем уменьшения амплитуды ВФ в области рассеивающего потенциала  $U_S(\vec{r})$  за счет локализации электронов в слое бинарного соединения – вставки InAs в КЯ. Слой InAs, помещенный внутри In $_{0.53}$ Ga $_{0.47}$ As создает дополнительную потенциальную яму для электронов и локализует их, приводя к снижению рассеяния на флуктуациях состава. Расположенная в центре КЯ In $_{0.53}$ Ga $_{0.47}$ As/In $_{0.52}$ Al $_{0.48}$ As вставка InAs одновременно уменьшает амплидуту хвостов электронных ВФ в барьерах и, следовательно, снижает и примесное рассеяние [64]. Таким образом, оптимизация конструкции активной области гетероструктуры должна учитывать влияние вариаций геометрии слоев МЛГ на энергии и пространственное распределение, эффективные массы электронов в КЯ, на количество заполненных подзон размерного квантования, т.е. проводиться с учетом результатов моделирования зонной структуры МЛГ.

Как следует из приведенного обзора, сведения об энергии и заполнении квантовых электронных состояний в КЯ необходимы при разработке новых конструкций и технологии получения гетероструктур для НЕМТ применений. Электронный энергетический спектр в МЛГ исследуют оптическими методами — спектроскопией ФЛ, а также измерениями фотопоглощения и фотоотражения.

# 1.3 Фотолюминесцентная спектроскопия гетероструктур с квантовыми ямами InGaAs/InAlAs

Фотолюминесценция (ФЛ) – явление испускания электромагнитной энергии веществом в результате возбуждения оптическим излучением. В полупроводниках при поглощении энергии возбуждающего излучения происходит рождение неравновесных электронов и дырок. Измерение спектра излучения, возникающего при рекомбинации электронов и дырок, позволяет получать информацию о зонной структуре полупроводников и полупроводниковых гетероструктур, т.е. об энергии электронных и дырочных состояний и их заполнении. ФЛ является неразрушающим и оперативным методом, не требующим специальной подготовки образцов к измерениям. Высокая чувствительность спектров ФЛ к химическому составу полупроводниковых твердых растворов, к химической чистоте и наличию примесей и дефектов обусловили широкое применение метода для исследования низкоразмерных гетероструктур.

Явления, происходящие в полупроводниках при фотолюминесценции можно разделить на три группы [65] (рисунок 1.7):

1. Возбуждение электронно-дырочных пар. При поглощении фотона с энергией  $\hbar\omega_{\rm exc}$  происходит переход электрона из исходного (заполненного) состояния в валентной зоне в конечное (пустое) состояние в зоне проводимости. В процессе поглощения света могут участвовать различные энергетические зоны полупроводника (зоны легких и тяжелых дырок, спин-орибитально отщепленная зона, различные зоны проводимости). Наиболее вероятными являются переходы с участием валентной зоны тяжелых дырок из-за высокой эффективной массы носителей заряда и, следовательно, высокой плотности состояний в этой зоне. При поглощении фотона должны выполняться законы сохранения энергии и квазиимпульса:

$$E_f = E_i + \hbar \omega_{exc}, \tag{1.10}$$

$$\hbar \vec{k}_f = \hbar \vec{k}_i + \hbar \vec{k}_{exc}, \tag{1.11}$$

где i и f обозначают начальное и конечное состояния электрона. Кроме прямых межзонных переходов ( $\hbar k_f \approx \hbar k_i$ ) также возможны переходы с поглощением фотонов при участии третьих частиц, например, фононов. Зависимость темпов генерации G носителей заряда от глублины z имеет экспоненциальный вид (закон Бугера):

$$G(z,\hbar\omega_{exc}) = \left[1 - R(\hbar\omega_{exc})\right]\alpha(\hbar\omega_{exc})e^{-\alpha(\hbar\omega_{exc})z}F_0, \tag{1.12}$$

где  $R(\hbar\omega_{\rm exc})$  — коэффициент отражения поверхности,  $\alpha(\hbar\omega_{\rm exc})$  — коэффициент поглощения полупроводника,  $F_0$  — падающий на поверхность поток фотонов. Глубина проникновения света  $1/\alpha$  зависит от соотношения  $\hbar\omega_{\rm exc}$  и  $E_{\rm g}$ , а также от зонной структуры полупроводника (прямозонный или непрямозонный). Для  ${\rm In}_x{\rm Ga}_{1-x}{\rm As}$  и  ${\rm In}_x{\rm Al}_{1-x}{\rm As}$  ( $x\approx0.5$ ) глубина проникновения света  $1/\alpha$  с энергией фотонов порядка 2 эВ составляет ~ 100 нм и ~180 нм, соответственно [66].

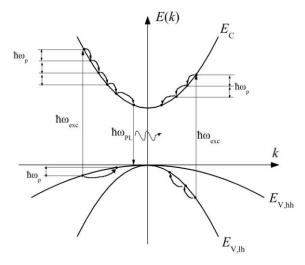


Рисунок 1.7 — Схематическое изображение процессов поглощения фотона  $\hbar\omega_{\rm exc}$ , термализации электронов и дырок с испусканием оптических фононов  $\hbar\omega_p$  и рекомбинации.

2. Термализация и диффузия электронов и дырок. Так как  $\hbar\omega_{\rm exc}$  больше  $E_{\rm g}$ , то рождаемые при поглощении фотона электроны и дырки имеют избыточную кинетическую энергию,

превышающую тепловую энергию kT. Поэтому фотовозбужденные носители заряда релаксируют к краям энергетических зон, т.е. достигают состояния теплового равновесия с решеткой, термализуются. Процесс термализации можно разделить на три этапа, характеризующиеся различными временными масштабами [67]. На первом этапе за время порядка времени релаксации испульса (сотни фемтосекунд) происходит термализация внутри подсистем свободных электронов и дырок за счет электрон-электронного взаимодействия, при этом функция распределения носителей заряда по энергии принимает квазиравновесный вид, но с температурой, превышающей температуру решетки (горячие электроны и дырки). На втором этапе электроны и дырки теряют избыточную кинетическую энергию в основном за счет испускания оптических фононов  $\hbar\omega_p$  до тех пор, пока кинетическая энергия носителей заряда не станет меньше энергии одного фонона  $\hbar\omega_p$  (время порядка 100 пс). Затем охлаждение электронного и дырочного газа до температуры кристаллической решетки происходит за счет испускания акустических фононов за время порядка наносекунд. Характерное время этого процесса по порядку величины совпадает с временем рекомбинации электронов и дырок.

Гетероструктуры состоят из полупроводников с различающимся коэффициентом поглощения  $\alpha(\hbar\omega_{\rm exc})$ , поэтому генерация носителей заряда по глубине является неоднородной. Одновременно с термализацией происходит диффузия электронов и дырок из областей с большей в области с меньшей плотностью носителей заряда. В гетероструктурах на движение носителей заряда оказывают влияние встроенные электрические поля, вызванные легированием или поверхностным потенциалом, а также потенциальная энергия электронов и дырок, связанная с разрывами энергетических зон на гетерограницах. Как правило, носители заряда диффундируют и захватываются в узкозоные слои гетероструктур – КЯ.

Длина диффузии  $L_D$  - расстояние, которое неравновесный носитель заряда в среднем преодолевает от момента рождения до рекомбинации. Для объемных полупроводников:

$$L_D^2 = D\tau, (1.13)$$

где D — коэффициент диффузии,  $\tau$  — время жизни. Для полупроводников с одним типом носителей заряда коэффициент диффузии связан с подвижностью неосновных носителей заряда соотношением Эйнштейна:

$$D_{e,h} = \frac{\mu_{e,h}kT}{e},\tag{1.14}$$

 $\mu_{e,h}$  — дрейфовая подвижность электронов e или дырок h. В собственных полупроводниках диффузия является амбиполярной и коэффициент диффузии имеет более сложный вид [68]. Проводя оценки, для  $\mu = 10^4$  см<sup>2</sup>/Вс и  $\tau = 10^{-7}$  с при температуре T = 77 К длина диффузии  $L_D$  составляет 1 мкм. Таким образом, при глубине проникновения возбуждающего ФЛ света в

сотни нанометров, за счет диффузии толщина области гетероструктуры, которая анализируется при помощи ФЛ, может быть значительно больше.

3. Рекомбинация электронов и дырок. Механизмы рекомбинации электронов и дырок классифицируют по типу участвующих в переходах состояний (переходы зона-зона, с участием примесей, с участием дефектов, экситонная рекомбинация) и разделяют на излучательные (с испусканием фотона) и безызлучательные (с передачей энергии другой частице — электрону, фонону и др.). Время жизни носителей заряда:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_r} + \frac{1}{\tau_{nr}}. (1.15)$$

зависит от частот излучательных  $1/\tau_r$  и безызлучательных  $1/\tau_{nr}$  процессов.

Интенсивность ФЛ в узком спектральном диапазоне энергий фотонов [ $\hbar\omega$ ,  $\hbar\omega+d\hbar\omega$ ] пропорциональна числу спонтанных переходов электронов в единицу времени  $R_{sp}(\hbar\omega)$  из исходных (заполненных) состояний в конечные (пустые) состояния с испусканием фотона с энергией  $\hbar\omega$ . В соответствии с золотым правилом Ферми темп излучательных переходов  $R_{sp}(\hbar\omega)$  пропорционален вероятности перехода и вероятности того, что исходное состояние заполнено, а конечное – свободно [65]:

$$R_{sp}(\hbar\omega)d\hbar\omega = \sum_{i,f} \left| H_{if} \right|^2 F_i (1 - F_f) \delta(E_i - E_f - \hbar\omega) \cdot d\hbar\omega, \tag{1.16}$$

где  $|H_{if}|^2$  — матричный элемент оператора импульса между исходным (i) и конечным (f) состояниями, характеризующий возмущение электронной системы со стороны электромагнитного поля,  $F_i$  и  $F_f$  — вероятности заполнения исходного и конечного состояний, суммирование проводится по всем возможным состояниям i и f, но вклад в сумму (1.16) дают только те переходы, для которых выполняется закон сохранения энергии  $E_i$  —  $E_f$  =  $\hbar \omega$ , что обеспечивается дельта-функцией.

Для прямозонных полупроводников с квадратичным законом дисперсии спектральная зависимость темпа межзонной рекомбинации имеет вид:

$$R_{sp}(\hbar\omega) \propto (\hbar\omega - E_g)^{1/2} \exp\left[-\frac{\hbar\omega - E_g}{kT}\right],$$
 (1.17)

максимум линии  $\Phi$ Л расположен при энергии фотонов  $\hbar\omega_{\rm max}=E_{\rm g}+1/2kT$ , а ширина на уровне половинной амплитуды составляет  $\Delta E=1.8kT$ . Измерение краевой  $\Phi$ Л — один из широко распространенных методов измерения ширины запрещенной зоны эпитаксиальных твердых растворов и, следовательно, определения их состава. При возбуждении избыточных носителей заряда полупроводник выходит из равновесного состояния. Однако при стационарной  $\Phi$ Л электронную и дырочную подсистемы можно считать квазиравновесными, поскольку времена жизни  $\tau$  неравновесных носителей заряда намного превышают время термализации. В этом

случае электроны и дырки обладают равновесной функцией распределения с температурой  $T_{\rm e}$  (входящей в уравнение 1.17), которая может превышать температуру решетки.

Кроме прямой межзонной рекомбинации свободных электронов и дырок в полупроводниках может наблюдаться рекомбинация с участием мелких и глубоких примесей, а также экситонов. Как правило, в спектрах ФЛ нелегированных твердых растворов InGaAs и InAlAs, полученных методом МЛЭ, примесные полосы ФЛ отсутствуют. Кулоновское взаимодействие электрона и дырки может привести к образованию связанной электроннодырочной пары (экситона). Энергия связи основного состояния экситона:

$$E_X = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*} \frac{e^4}{2m_0 \hbar^2 \varepsilon^2},$$
 (1.18)

где  $m_h^*$  - усредненная эффективная масса тяжелых и легких дырок. Энергия связи экситона для  $In_xGa_{1-x}As$  и  $In_xAl_{1-x}As$  ( $x\approx 0.5$ ) составляет 2.7 мэВ [69] и 5.1 мэВ [70], соответственно. При образовании экситонов в спектрах излучения/поглощения полупроводников появляется линия, расположенная ниже ширины запрещенной зоны  $E_g$  на величину  $E_X$ . При низких температурах ( $T\sim 4$  K) экситонная линия может иметь тонкую структуру в связи с образованием связанных экситонов на дефектах и примесях. Спектральная форма экситонной линии излучения обычно описывается гауссовой функцией из-за влияния различных механизмов уширения (взаимодействия с фононами, флуктуаций состава твердых растворов, дефектов):

$$S(\hbar\omega) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}\sigma} \exp\left[-\frac{(\hbar\omega - E_X)^2}{2\sigma^2}\right]. \tag{1.19}$$

Так как при высоких температурах экситоны диссоциируют, то экситонная  $\Phi \Pi$  обычно наблюдается при температурах  $kT < E_X$ .

При рассмотрении межзонных оптических переходов в гетероструктурах необходимо учитывать, что ВФ электрона в начальном и конечном состоянии можно представить в виде произведения огибающей  $\psi_i$  и быстроосциллирующей (блоховской) функций. В этом случае выражение для матричного элемента  $H_{if}$  в выражении (1.16) имеет вид [71]:

$$H_{if} = H^{0} \cdot \int \psi_{i}^{*} \psi_{f} d\vec{r} = H^{0} \cdot M_{ii}, \tag{1.20}$$

где  $H^0$  — матричный элемент оператора импульса между блоховскими функциями исходного и конечного состояния,  $M_{ij}$  — интеграл перекрытия огибающих ВФ электрона в начальном и конечном состоянии. Так как матричный элемент  $H^0$  в КЯ одинаков для всех подзон размерного квантования, то вероятность межзонных переходов в КЯ с участием различных подзон определяется интегралом перекрытия  $M_{ij}$  огибающих ВФ электронов и дырок. Так, в КЯ с симметричным потенциалом (например, прямоугольным) огибающие ВФ электронов и дырок в точке k=0 обладают четностью: функции  $\psi_i$  являются симметричными относительно центра

КЯ в подзонах с нечетными номерами и антисимметричны в подзонах с четными номерами. Благодаря этому обстоятельству оптические переходы в симметричных КЯ разрешены между подзонами размерного квантования одинаковой четности (рисунок 1.8 *a*).

Оптические свойства нелегированных КЯ исследованы довольно подробно [72, 73], в том числе на основе таких материалов, как GaAs/AlGaAs [74,75], InGaAs/GaAs [76,77] и InGaAs/InAlAs [78]. При низких температурах спектры ФЛ обычно определяются экситонной рекомбинацией между подзонами электронов  $e_i$  и тяжелых  $hh_i$  или легких  $lh_i$  дырок с одинаковыми номерами (i = j). В большинстве случаев наблюдается одиночный пик с i = j = 1. В некоторых случаях это правило отбора может нарушаться, например, при исследовании спектров ФЛ нелегированных КЯ при высоком уровне оптического возбуждения, при котором существенным является эффект заполнения подзон носителей заряда [79]. Из-за квантового ограничения электронов и дырок в одной области КЯ в гетероструктурах типа I энергия связи экситона в несколько раз превышает значение для объемного случая [80], а интеграл перекрытия электронной и дырочной ВФ является большим, что приводит к возможности наблюдения экситонных спектров ФЛ при комнатной температуре. Форма линии ФЛ нелегированных КЯ обычно описывается выражением (1.19), а ее уширение вызвано, кроме взаимодействия с фононами, разупорядочиванием тройных твердых растворов КЯ и барьеров, приводящим к флуктуациям ширины запрещенной зоны, а также шероховатостью гетерограниц, приводящей к изменениям ширины ямы. Поэтому ширина низкотемпературной ФЛ нелегированных КЯ часто служит для оценки их структурного совершенства.

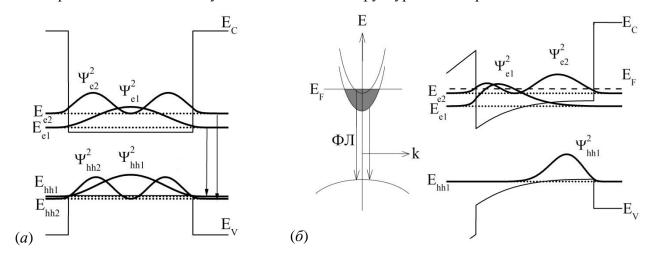


Рисунок 1.8 — Энергии и квадраты огибающей ВФ электронов и тяжелых дырок в a) нелегированной КЯ,  $\delta$ ) односторонне-легированной КЯ.

Высокая плотность ДЭГ в результате легирования КЯ приводит к существенной модификации ее оптических свойств. В диапазоне сильного легирования при плотности ДЭГ в КЯ более  $1\cdot10^{11}$  см $^{-2}$  (этот диапазон является значимым с практической точки зрения) в

результате заполнения фазового пространства происходит экранирование ДЭГ кулоновского взаимодействия электронов и дырок в экситонах, приводящее к диссоциации экситонов [81]. В этих условиях оптические свойства МЛГ определяются межзонной рекомбинацией свободных электронов и фотовозбужденных дырок в КЯ [82]. В спектрах люминесценции КЯ наблюдаются нестолько полос, количество которых равно количеству заполненных электронных подзон размерного квантования. Каждая полоса соответствует переходам ei-hh1, где ei – i-я подзона электронов, hh1 – основная подзона тяжелых дырок. Соотношение интенсивностей этих полос определяется заполнением электронных состояний, т.е. соотношением парциальных концентраций электронов в подзонах, а также интегралами перекрытия  $M_{ii}$  электронных и дырочных волновых функций в подзонах [83].

Особенность ФЛ МЛГ, содержащих ДЭГ в КЯ связана с нарушением симметрии потенциала квантовой ямы под влиянием электрических полей ионизированных примесей и вырожденного электронного газа. Изгиб зон приводит к снятию правил отбора по четности на межзонные оптические переходы (рисунок 1.8~6) [84]. В МЛГ с двусторонним симметричным легированием спектры ФЛ по положению мало отличаются от спектров нелегированных КЯ (однако, характеризуется большей шириной) [85]. Из-за электростатического взаимодействия электронов в центре КЯ формируется параболический потенциальный барьер, однако его высота существенно меньше глубины КЯ. Зависимость энергии межзонных переходов от концентрации для симметричных структур является линейной, но при концентрациях  $n_{\rm S} < 10^{12}$  см $^{-2}$  смещение линий ФЛ не превышает нескольких мэВ и им можно пренебречь.

Влияние электростатического потенциала на состояния носителей заряда более существенно в несимметрично легированных гетероструктурах [ 86, 87 ] (рисунок 1.8 б). Взаимодействие электронов и дырок с ионизированными примесями в одностороннелегированных структурах приводит к асимметричному распределению носителей заряда в КЯ и локализации электронов и дырок вблизи противоположных границ КЯ. По отношению интенсивностей пиков e1-h1 и e2-h1 на спектрах ФЛ при изменении плотности электронов можно судить о наклоне профиля потенциала КЯ [88]. Наклон энергетических зон приводит к смещениям энергий переходов за счет квантово-размерного эффекта Штарка в КЯ [89]. В этом случае существенным является эффект экранирования поля ионизированных примесей электронами, и для определения энергий и ВФ носителей заряда требуется самосогласованное решение системы уравнений Шредингера-Пуассона.

При увеличении плотности ДЭГ в КЯ происходит уменьшение ширины запрещенной зоны [90]. Этот эффект, называемый перенормировкой ширины запрещенной зоны, является фундаментальным свойством как объемных полупроводников, так и низкоразмерных систем и возникает в результате многочастичных обменно-корреляционных взаимодействий.

Экспериментально величина перенормировки ширины запрещенной зоны оценивается по разнице между положениями спектров ФЛ и возбуждения ФЛ от КЯ [91] или по разнице между наблюдаемыми энергиями оптических переходов и результатами расчетов [87]. Для учета эффекта перенормировки при моделировании зонной структуры МЛГ в гамильтониан системы при решении уравнения Шредингера добавляют обменно-корреляционный потенциал [92].

Свободные носители заряда в КЯ заполняют все состояния от краев энергетических подзон до уровня Ферми  $E_{\rm F}$ . Если заполненной является одна электронная подзона, то уровень Ферми определяется выражением  $E_{\rm F}-E_1=n_{\rm S}\cdot\pi\hbar^2/m_{\rm e}^*$ . При плотности ДЭГ  $n_{\rm S}=1\cdot10^{12}~{\rm cm}^{-2}$  энергия Ферми составляет приблизительно 35 мэВ в КЯ AlGaAs/GaAs и 50 мэВ в КЯ  $\ln_{0.53}{\rm Ga}_{0.47}{\rm As/In}_{0.52}{\rm Al}_{0.48}{\rm As}$ . При такой плотности ДЭГ электронные состояния вблизи уровня Ферми обладают большим квазиимпульсом в плоскости КЯ:

$$k = \frac{\sqrt{2m_e^* E}}{\hbar} \,. \tag{1.21}$$

При плотности ДЭГ  $n_{\rm S}=1\cdot 10^{12}~{\rm cm}^{-2}$  квазиимпульс электронов на уровне Ферми составляет порядка  $10^6~{\rm cm}^{-1}$ . После возбуждения неравновесных носителей заряда в МЛГ дырки термализуются к вершинам дырочных подзон размерного квантования в состояния с  $k\approx 0$ , а электроны заполняют низшие пустые состояния в электронных подзонах, т.е. состояния вблизи уровня Ферми. В отличие от вырожденного ДЭГ энергетическое распределение дырок в КЯ является невырожденным при низком уровне возбуждения. Если бы исследуемая гетероструктура была идеально двумерной с гладкими гетерограницами, то вследствие закона сохранения импульса на оптические переходы только малая часть электронов, находящаяся вблизи доньев подзон размерного квантования с малым квазиимпульсом  $k\approx 0$ , могла бы участвовать в рекомбинации. В этих условиях спектры ФЛ легированных структур по форме не отличаются от спектров структур с низкой концентрацией собственных носителей [93].

Обычно в гетероструктурах существует структурный беспорядок — шероховатости гетерограниц, флуктуации состава твердых растворов InGaAs и InAlAs, который может вызывать локализацию дырок в плоскости КЯ. Экспериментаольно локализация дырок была подтверждена путем исследования ФЛ и фотопроводимости МЛГ InGaAs/InP в зависимости от амплитуды приложенного поперечного магнитного поля B [94]. Локализация дырок приводит к смягчению правил отбора, связанных с законом сохранения квазиимпульса, позволяя всем электронам с энергиями от доньев подзон размерного квантования до уровня Ферми учавствовать в межзонных переходах. В этом случае ширина линии ФЛ равна ширине энергетического распределения ДЭГ, т.е. расстоянию  $E_F - E_1$  (энергии Ферми электронов). Если предположить, что при межзонных переходах в МЛГ нарушается закон сохранения квазиимпульса, и матричный элемент перехода слабо зависит от квазиимпульса электрона, то

форма линии люминесценции описывается прямоугольной функцией распределения электронов по энергии с некоторым уширением на низкоэнергетическом и высокоэнергетическом краях [95]. Ширина линии в соответствии с выражением (1.6) пропорциональна разности  $E_F - E_1$ .

Форма линии ФЛ для прямого межзонного перехода между электронной подзоной i и дырочной подзоной j определяется комбинированной плотностью состояний  $D(\hbar\omega)$  и вероятностью заполнения состояний в зоне проводимости  $f_{\rm e}(\hbar\omega)$  и валентной зоне  $f_{\rm h}(\hbar\omega)$  [96]:

$$I_{ii}(\hbar\omega) = A_{ii} \cdot D(\hbar\omega) \cdot f_e(\hbar\omega) \cdot f_h(\hbar\omega), \tag{1.22}$$

где  $A_{ij}$  — численный множитель, который содержит межзонный матричный элемент перехода. Для идеальной двумерной системы плотность состояний  $D(\hbar\omega)$  является ступенчатой функцией с центром при оптической ширине запрещенной зоны  $E_{gij} = E_{ei}$  -  $E_{hj}$  для подзон i и j. Однако межэлектронное взаимодействие, а также структурные несовершенства приводят к уширению ступенчатой функции состояний, которая принимает вид [93]:

$$D(\hbar\omega) \propto 1/\{1 + \exp\left[-\left(\hbar\omega - E_{gij}\right)/\Gamma\right]\},\tag{1.23}$$

где  $\Gamma$  – параметр уширения, который составляет порядка 1 – 10 мэВ. Различные механизмы неоднородного уширения влияют на форму низкоэнергетического хвоста линии ФЛ и величину  $\Gamma$ : шероховатости гетерограниц КЯ, флуктуации тройных твердых растворов [97], процессы с участием примесей [98].

Заполнение электронной подзоны описывается функцией распределения Ферми-Дирака. Чтобы записать эту функцию с аргументом — энергией фотона необходимо воспользоваться законами сохранения энергии (1.10) и квазиимпульса (1.11) при межзонном переходе. Для квадратичного закона дисперсии электронов и дырок, описываемого эффективной массой, энергия E электрона, учавствующего в межзонном оптическом переходе  $\hbar\omega$  равна:

$$E = \frac{m_h^*}{m_e^* + m_h^*} \hbar \omega + \frac{m_e^*}{m_e^* + m_h^*} E_{gij},$$
(1.24)

$$f_{e}(\hbar\omega) = \frac{1}{1 + \exp\left[\left[\frac{m_{h}^{*}}{m_{h}^{*} + m_{e}^{*}} \hbar\omega + \frac{m_{e}^{*}}{m_{h}^{*} + m_{e}^{*}} E_{g} - E_{F}\right]/kT\right]}.$$
(1.25)

Для описания функции распределения дырок  $f_h(\hbar\omega)$  обычно необходимы дополнительные предположения о характере дырочных состояний и их заполнении.  $f_h(\hbar\omega)$  зависит от температуры и плотности возбуждения и может иметь как Больцмановский, так и Фермиевский вид. Также функция распределения дырок может зависеть от характера дырочных состояний и от того, локализуются ли дырки на структурных неоднородностях КЯ [99].

В большинстве случаев ширина спектров ФЛ МЛГ структур зависит от концентрации ДЭГ. В основе этой зависимости лежит линейная связь между энергией Ферми и двумерной

концентрацией электронов в подзонах  $n_i$ . Наиболее полно связь между спектрами  $\Phi \Pi$  и концентрацией электронов  $n_S$  была исследована для PHEMT структур AlGaAs/InGaAs/GaAs, в результате чего были предложены несколько методов оценки  $n_S$  по низкотемпературным или комнатным спектрам  $\Phi \Pi$ . По своей сути все методы основаны на определении величин  $E_i$  и  $E_F$  по спектрам  $\Phi \Pi$  и расчете концентрации электронов по формуле (1.6). Соответственно, точность метода опирается на точность выбранного способа определения величин  $E_i$  и  $E_F$ .

В работе [100] принималось, что энергии подзон  $E_i$  соответствуют максимумам пиков на спектрах  $\Phi \Pi$ , а энергия  $E_{\rm F}$  – точке перегиба на высокоэнергетическом спаде интенсивности  $\Phi \Pi$ (такой перегиб наблюдается при низкой температуре  $T \sim 10$  K). Рассчитанные по формуле (1.6) плотности электронов находились в хорошем согласии с измерениями эффекта Шубникова-де Гааза. В некоторых работах [101] энергии межзонного перехода оценивались не по максимуму пика ФЛ, а приблизительно по центру низкоэнергетического спада интенсивности, согласно выражению (1.22). Определение величин  $E_i$  и  $E_F$  по спектрам  $\Phi \Pi$  при гелиевых температурах не составляет большого труда, поскольку как край межзонной люминесценции, так и энергия Ферми четко проявляются на низкоэнергетическом и высокоэнергетическом хвостах пиков ФЛ [102]. При повышении температуры регистрации спектров ФЛ происходит тепловое размытие оптических особенностей гетероструктур, уширение высокоэнергетического низкоэнергетического хвостов пиков [84]. Поэтому для точного определения  $E_i$  и  $E_{\rm F}$  по спектрам ФЛ, полученным при комнатной температуре или температуре 77 К, необходимы специальные методы. Например, в работе [103] было предложено определять положение уровня Ферми по температурной зависимости отношения интенсивностей переходов e2-hh1 и e1-hh1. В ряде работ величины  $E_i$  и  $E_F$  определялись путем параметрической подгонки формы кривых  $\Phi \Pi$ с помощью феноменологической модели на основе уравнений (1.23-1.25) как для низкотемпературных спектров [95, 104], так и для спектров, полученных при комнатной температуре [105,106]. В некоторых случаях, когда точное определение параметров  $E_i$  и  $E_{\rm F}$  по спектрам ФЛ было затруднено, наблюдалась простая прямолинейная корреляционная зависимость между полушириной  $\Delta$  пиков  $\Phi \Pi$  от PHEMT структур и плотностью электронов  $n_S$ [107,108]. По измерениям спектров ФЛ и эффекта Холла на серии опорных образцов строилась прямая зависимости  $n_S(\Delta)$ , которая затем использовалась для неразрушающего определения плотности электронов по спектрам ФЛ. Хоть этот метод может быть эффективен в технологии, где часто приходится измерять параметры однотипных гетероструктур, но его недостатком является применимость только к узкому классу гетероструктур. Существенное изменение конструкции МЛГ – состава ямы или толщины – потребует построения новой зависимости  $n_S(\Delta)$ . Таким образом, спектроскопия  $\Phi\Pi$  нашла широкое применение в исследованиях псевдоморфных HEMT наногетероструктур AlGaAs/InGaAs/GaAs. Дополнительное сравнение

полученных энергий межзонных переходов с моделью зонной диаграммы КЯ, построенной с помощью самосогласованного решения системы уравнений Шрёдингера-Пуассона, позволяет оценить такие параметры  $In_xGa_{1-x}As$  КЯ, как ширина и содержание индия в слое [109].

Согласно исследованиям МЛГ на основе материалов InGaAs/InAlAs, основные особенности спектров ФЛ таких структур аналогичны РНЕМТ на подложках GaAs. Пики ФЛ от КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  расположены при 0.8 эВ (низкие температуры) и при 0.7 эВ при комнатной температуре. При изменеии содержания Іп в КЯ положение пика ФЛ смещается в соответствии с изменением  $E_g$  (InGaAs) [110, 111]. Между плотностью электронов и шириной пиков ФЛ таких структур также была обнаружена линейная зависимость [95,112] с разбросом по концентрации от прямой линии не более  $\pm 0.3 \cdot 10^{12}$  см<sup>-2</sup>. В работе [113] обнаружена зависимость соотношения интенсивностей пиков ФЛ с участием 1 и 2 подзон от слоевой концентрации электронов, которая определяет наклон потенциального профиля в КЯ. При исследовании наногетероструктур InGaAs/InAlAs применение спектроскопии ФЛ помогает анализировать не только узкозонную область квантовой ямы, но и область буфера InAlAs, определять его состав. Особенно это актуально для МНЕМТ структур, содержащих толстый буфер переменного состава. Так, в работе [114] в спектрах  $\Phi \Pi$  от барьерного слоя  $In_{0.29}Al_{0.71}As$ были обнаружены два близко расположенных пика. Оказалось, что они связаны со слоями буфера, выращенных при различных температурах. По технологии эти слои должны иметь имеющими одинаковый состав, но сегрегация и реиспарение индия в процессе эпитаксиального роста после увеличения температуры подложки привели к уменьшению содержания индия в верхней части барьерного слоя, что и вызвало дублетное расщепление описанного пика. В работе [47] обнаружено существенно уширении линии ФЛ (полуширина около 0.3 эВ) от метаморфного буфера InAlAs, выращенного при низкой температуре, что объясняется кластерообразованием в твердом растворе InAlAs. Форма спектра в этом случае хорошо описывается гауссовой кривой.

Однако, в литературе опубликовано очень мало работ, в которых исследуются оптические свойства МЛГ с КЯ  $In_xGa_{1-x}As/In_xAl_{1-x}As$  (содержание индия  $x\approx0.5$ ), содержащих нанометровые вставки InAs в КЯ, несмотря на значимость такой конструкции гетероструктур. Только в работе [115] представлены спектры ФЛ МЛГ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ , содержащих центральные слои InAs толщиной 5 нм. Максимумы пиков ФЛ от КЯ располагались приблизительно при  $0.58\,$  эВ, но наблюдался некоторый разброс между образцами, объяснявшийся технологическими различиями условий эпитаксиального роста — температуры подложки. В литературе широко обсуждались оптические свойста нелегированных гетероструктур на основе гетеропары  $InAs/In_{0.53}Ga_{0.47}As$  — КЯ и квантовых точек. Ссылки и обсуждение этих работ приведены в главе 4. Также в литературе можно найти исследования

гетероструктур GaAs/InGaAs, в которых упругонапряженный слой узкозонного InGaAs выращивается на подложке GaAs. Однако, экспериментальные либо теоретические исследования оптических свойств гетероструктур, содержащих гетеропереходы GaAs/  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ , в которых напряженным является слой GaAs внутри ненапряженного InGaAs, в литературе отсутствуют.

#### Выводы

Актуальной задачей современной технологии является совершенствование и разработка новых продуманных конструкций гетероструктур на основе системы материалов InGaAs/InAlAs для повышения транспортных свойств ДЭГ в КЯ. Во многом, электронные свойтва таких систем определяются распределением ВФ электронов и заполнением электронных подзон, поэтому изучение электронного спектра в МЛГ InGaAs/InAlAs как путем теоретического расчета зонной структуры, так и экспериментального исследования оптических спектров, имеют научную и практическую значимость. Несмотря на то, что фундаментальные оптические свойства КЯ, содержащих ДЭГ, достаточно подробно изучены, определение особенностей электронного спектра в новых типах МЛГ имеют ценность для совершенстования техники зонной инженерии электронных состояний в гетероструктурах, а также для развития методов контроля параметров гетероструктур в технологии эпитаксии.

В литературе практически отсутствуют работы по исследованию влияния тонких слоеввставок InAs и GaAs на оптические свойства МЛГ InGaAs/InAlAs на подложках InP. Исследования влияния профиля химического состава в МБ на оптические свойства МНЕМТ гетероструктур также являются незавершенными на сегодняшний день. Настоящая работа посвящена изучению этих вопросов.

## Глава 2. Экспериментальные и теоретические методы исследования

#### 2.1 Молекулярно-лучевая эпитаксия

## 2.1.1 Молекулярно-лучевая эпитаксия твердых растворов AlGaInAs

В настоящей работе для получения HEMT InGaAs/InAlAs гетероструктур на подложках InP, содержащих нанометровые вставки InAs и GaAs, а также MHEMT InGaAs/InAlAs гетероструктур был использован метод молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ).

Эпитаксия — процесс выращивания кристаллографически ориентированного монокристаллического слоя на монокристаллической подложке. В зависимости от среды, по которой осуществляется перенос компонент выращиваемого вещества к подложке, различают молекулярно-лучевую, газофазную и жидкофазную эпитаксию [116]. Монокристаллическая подложка при росте играет роль затравочного кристалла, и в случае, если кристаллические структуры выращиваемой пленки и подложки подобны, кристаллическая структура и ориентация эпитаксиального слоя воспроизводит структуру подложки. При наличии в подложке дислокаций и других структурных дефектов они также могут прорасти в эпитаксиальный слой

МЛЭ — ориентированный рост одного кристалла на поверхности другого в результате осаждения компонентов из атомных или молекулярных потоков на нагреваемую монокристаллическую подложку в условиях сверхвысокого вакуума. МЛЭ используется для выращивания многокомпонентных полупроводниковых твердых растворов  $A^{III}B^{V}$  и  $A^{II}B^{VI}$  и наногетероструктур на их основе — двумерных, одномерных и нульмерных [117].

Управление составом выращиваемых в процессе МЛЭ пленок осуществляется за счет изменения соотношения молекулярных потоков компонентов [ 118 ]. Путем регулировки потоков источников можно получать структуры с плавным изменением состава полупроводников, например, МНЕМТ на метаморфном буфере [119], светодиоды с варизонной активной областью [120]. Для резкого прерывания или возобновления молекулярных потоков отдельных компонентов используются заслонки. Благодаря низкой скорости роста, манипулирование заслонками позволяет производить изменение состава молекулярного потока за время меньшее, чем время роста единичного молекулярного слоя и формировать, таким образом, резкие гетерограницы.

Сверхвысокий вакуум при МЛЭ поддерживается, во-первых, для обеспечения высокой длины свободного пробега атомов и молекул молекулярного пучка. При давлении порядка  $10^{-8}$  Па длина свободного пробега молекул превышает  $1\,$  м, что больше расстояния между молекулярными источниками и подложкой, а также размеров ростовой камеры. В результате

атомы и молекулы, испаряемые из источников, движутся к подложке по прямолинейной траектории. Во-вторых, высокий вакуум необходим для снижения загрязнения поверхности изза внедрения фоновых примесей в растущий слой. Количество атомов, попадающих на ростовую поверхность из остаточной атмосферы, можно оценить из выражения молекулярно-кинетической теории газов для плотности потока частиц с массой M при давлении газа P через единичное сечение [121]:

$$S = \frac{P}{\sqrt{2\pi M k_B T}}. (2.1)$$

Проводя оценки, для молекул с относительной молекулярной массой 40 при  $T=300~{\rm K}$  и  $P=10^{-8}~{\rm \Pi a}$  плотность потока S составляет  $4.3\cdot 10^{10}~{\rm cm}^{-2}\cdot {\rm c}^{-1}$ . Заполнение на подложке GaAs с ориентацией поверхности (1 0 0) одного монослоя, содержащего  $6.26\cdot 10^{14}~{\rm atomos/cm}^2$ , атомами примеси (при коэффициенте прилипания равном 1) будет происходить более 4 часов. Характерные скорости рости при МЛЭ – порядка 1 монослоя в секунду, поэтому используемый вакуум  $10^{-8}~{\rm \Pi a}$  обеспечивает практически беспримесное осаждение эпитаксиальных слоев.

Температура подложки при МЛЭ является одним из основных технологических условий роста, влияющих на структурное совершенство эпитаксиальных пленок и гетерограниц. С одной стороны, температура подложки определяет скорость поверхностной миграции адатомов (атомов, адсорбированных из молекулярных пучков на ростовую поверхность), отвечающей за формирование гладких, однородных эпитаксиальных слоев (недостаточно высокая скорость поверхностной миграции адатомов приводит к росту поликристаллических и аморфных пленок). С другой стороны, температура подложки должна быть достаточно низкой, чтобы за счет тепловой энергии не происходили распад связей растущей кристаллической структуры, десорбция адатомов, а также диффузия элементов между различными слоями гетероструктуры.

Эпитаксиальный рост гетероструктур InGaAs/InAlAs начинается с подготовки подложек GaAs или InP к росту, необходимой для удаления естественного окисла и загрязнений с поверхности. Рост на поверхности с остаточными окислами может привести к ухудшению кристаллического совершенства выращиваемых слоев, а диффузия остаточных примесей в процессе роста в активные слои гетероструктуры — к ухудшению электрофизических характеристик. Подготовка подложек осуществляется путем высокотемпературного отжига InP  $(T > 500 \, ^{\circ}\text{C})$  [122] или GaAs  $(T > 600 \, ^{\circ}\text{C})$  [123] в потоке молекул мышьяка As<sub>4</sub>.

При достаточно высоких температурах в вакууме на поверхности полупроводников III-V происходит диссоциативное испарение, в результате чего поверхность в основном покидают элементы V группы, образуются вакансии элементов V группы, а при существенном увеличении температуры или длительности нагрева – к образованию на поверхности жидких металлических капель из элементов III группы. Для компенсации эффекта испарения при

отжиге на подложку направляется пучок молекул элементов V группы, в результате чего устанавливается баланс процессов десорбции-адсорбции [124]. При отжиге подложки InP в потоке мышьяка на поверхности может происходить замещение атомов P атомами As и образование слоя арсенида индия InAs [125]. Толщина напряженного слоя InAs для температур порядка 470–520 °C и времени выдержки 10 мин составляет 2 – 4 монослоя [126].

При МЛЭ выращивании твердых растворов AlGaInAs обычно выбираются такие технологические условия, при которых коэффициенты прилипания элементов III группы равны единице и состав твердого раствора определяется отношением молекулярных потоков. В зависимости от состава AlGaInAs оптимальная температура роста может меняться в диапазоне  $450-650\,^{\circ}\mathrm{C}$  [127]. Для компенсации десорбции атомов As падающий поток молекул As<sub>4</sub> должен превышать поток элементов III группы. Отношение давления мышьяка в молекулярном потоке к суммарному давлению атомов элементов III группы  $\gamma$  (избыточное давление мышьяка) является важным технологическим параметром. Как правило, при оптимальных режимах МЛЭ независимо от величины  $\gamma$  в кристаллическую решетку встраивается такое количество атомов As, которое необходимо для обеспечения стехиометрического роста, а избыток атомов As десорбируется с поверхности, не участвуя в росте, т.е. стехиометрия эпитаксиального слоя соблюдается автоматически (это неверно для низкотемпературного режима роста,  $T < 350\,^{\circ}\mathrm{C}$ ).

Энергия связи атомов In существенно ниже по сравнению с Al и Ga при МЛЭ выращивании AlGaInAs. Это приводит к тому, что при температурах роста более 525 °C коэффициент прилипания атомов In становится меньше единицы [128, 129], т.е. часть атомов In, адсорбированных на ростовую поверхность из молекулярного пучка, могут покинуть поверхность подложки путем десорбции. Также атомы In при эпитаксии In-содержащих твердых растворов имеют тенденцию к сегрегации (обогащению ростовой поверхности слоя атомами In), которая наиболее отчетливо проявляется на гетерограницах при скачкообразном изменении содержания In в эпитаксиальных слоях [130].

Оптимальные условия роста слоя  $In_{0.52}Al_{0.48}As$  на подложке InP по сообщениям различных авторов лежат в диапазоне  $T_g = 500-530$  °C и  $\gamma = 25-150$  [131-133]. Из-за существенной разницы энергии In-As и Al-As связей при МЛЭ росте твердых растворов InAlAs может происходить кластерообразование [134, 135]. При низкой температуре подложки  $T_g < 500$  °C эффект кластерообразования приводит к снижению структурных (морфология поверхности и однородность) и оптических (интенсивность фотолюминесценции и ширина экситонного пика) свойств пленок  $In_{0.52}Al_{0.48}As$  [ 136 , 137 ] из-за развития флуктуаций химического состава твердого раствора InAlAs. При повышении температуры роста выше 530 °C коэффициент прилипания In и состав пленки InAlAs начинает зависеть от  $T_g$ .

Температуры выращивания слоев  $In_xAl_{1-x}As$  метаморфного буфера для МНЕМТ гетероструктур существенно ниже оптимальных и составляют 350 – 400 °C [138, 139]. Снижение температуры роста МБ осуществляется для замораживания дислокаций и других дефектов, образующихся при релаксации механических напряжений, внутри МБ. Низкая температура препятствует миграции структурных дефектов в активные области НЕМТ структур. Из-за существенного эффекта кластерообразования в эпитаксиальных слоях InAlAs, выращенных при таких низких температурах, спектры ФЛ от слоев МБ могут обладать заметным уширением линий [47, 140].

Оптимальные технологические условия МЛЭ получения слоев  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$  близки к условиям получения  $In_{0.52}Al_{0.48}As$ . Оптимальная температура составляет 500 - 520 °C при  $\gamma = 10 - 30$ . Это позволяет выращивать HEMT структуры на подложках InP при единых условиях роста для всех эпитаксиальных слоев [141, 142]. При росте сильно напряженных слоев  $In_xGa_{1-x}As$  (x > 0,7) используются температуры роста ниже 500 °C [39, 143] для уменьшения вероятности релаксации напряжений. Оптимальная температура роста КЯ  $In_xGa_{1-x}As$  зависит состава x и уменьшается с ростом содержания x InAs [144].

Вследствие большого рассогласования решетки InAs и InP (3.2 %) особое внимание следует уделять технологическим условиям роста InAs слоя при получении НЕМТ гетероструктур с составными КЯ, потому что релаксация упругих напряжений может ухудшить подвижность ДЭГ как при образовании дислокаций [56], так и при 3D росте нанокластеров InAs [145]. Согласно опубликованным данным, критическая толщина InAs на подложке InP для перехода от 2D к 3D росту составляет 2 - 4 монослоя при температуре подложки порядка 500 °C [146-148]. Движущей силой для образования InAs нанокластеров является энергия упругих деформаций эпитаксиального слоя InAs, а основным параметром, определяющим процесс образования нанокластеров InAs, является скорость поверхностной миграции атомов In, зависящая от температуры подложки. Для выращивания толстых двумерных слоев InAs обычно подбираются специальные технологические условия роста, далекие от равновесных и оптимальных для InAs, которые препятствуют образованию кластеров, например, пониженная температура роста [149, 150], рост на In-стабилизированной поверхности [151].

При выращивании напряженных слоев GaAs на InP при  $T_{\rm g} \sim 500$  °C также может формироваться шероховатая морфология поверхности эпислоя GaAs [152, 153], однако МЛЭ слоев GaAs на InP изучено значительно меньше, чем InAs на InP. Рассогласование параметра решетки GaAs и InP (3.7 %) близко по величине к InAs/InP, но имеет противоположный знак, поэтому механизмы роста слоев GaAs на InP могут существенно отличаться от InAs на InP.

При выращивании многослойных HEMT гетероструктур часто применяют прерывания роста – технологическую операцию, при которой на заданное время приостанавливается рост

пленок. Прерывания используются, во-первых, после изменения ростовых технологических условий для установления новых стационарных значений параметров. Во-вторых, во время прерывания роста осуществляется дельта-легирование, при котором атомы легирующей примеси высаживаются на поверхность. В-третьих, прерывание роста при определенных условиях способствует выглаживанию поверхности твердых растворов InGaAs и InAlAs [154]. Длительное прерывание может привести к встраиванию в решетку нежелательных примесей из вакуумной камеры, что может негативно сказаться на транспортных свойствах ДЭГ.

#### 2.1.2 Установка молекулярно-лучевой эпитаксии «ЦНА-24»

Экспериментальные образцы были выращены на установке "ЦНА-24" (НИТИ, г. Рязань) в лаборатории исследования процессов формирования низкоразмерных электронных систем в наногетероструктурных соединениях  $A^{III}B^{V}$  (зав. лаб. д.ф.-м.н. Галиев Г.Б.) в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте сверхвысокочастотной полупроводниковой электроники Российской академии наук (ИСВЧПЭ РАН).

На рисунке 2.1 приведена схема установки эпитаксии "ЦНА-24". В ростовой камере 7 осуществляется подготовка подложек к эпитаксиальному росту и выращивание гетероструктур. Загрузка подложек и выгрузка образцов осуществляют при помощи загрузочно-шлюзового устройства (ЗШУ) 8 в загрузочной камере, отделенной от камеры роста шиберной задвижкой 9 (сверхвысоковакуумным затвором). Емкость кассеты ЗШУ составляет 10 пластин подложек (GaAs, InP др.) диаметром 4, 5, 6 или 8 см. Процесс перемещения подложки, закрепленной на молибденовом носителе, из ЗШУ в ростовую камеру на подложкодержатель 5 обеспечивается передающим манипулятором 10.

Источниками молекулярных потоков являются эффузионные ячейки 1, состоящие из тигля из тугоплавкого пиролитического нитрида бора BN, нагревательного элемента и термопары. Нагревательный элемент из танталовой проволоки обеспечивает нагрев находящегося в тигле материала до рабочих температур. Потоки металлических элементов Al, Ga и In создают путем нагревания источников выше точки плавления и испарения атомов с поверхности расплавов, а поток атомов Si и молекул  $As_4$  – методом сублимации. Изменение плотности молекулярных потоков осуществляют за счет увеличения/уменьшения мощности нагрева источника с контролем его температуры по показаниям термопары. Контролируемое управление молекулярными потоками выращиваемых соединений производится заслонками источников 3 и основной заслонкой 4, экранирующей потоки от всех молекулярных источников одновременно. Управление положением заслонок и температурой источников производится автоматизировано и компьютеризировано с помощью блока управления с точностью  $\pm$  0.5 °C, что обеспечивает стабильность потока вещества  $\pm$ 1 %.

Использовались сверхвысокочистые материалы следующих марок: алюминий 6N5, индий 7N, галлий 7N5, мышьяк металлический 7N.

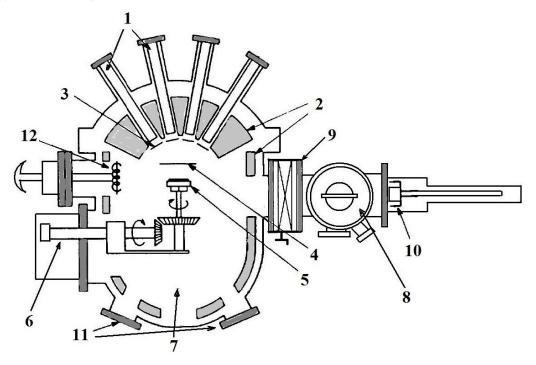


Рисунок 2.1 – Схема установки ЦНА – 24: 1 – эффузионные ячейки, 2 – криопанели, 3 – заслонки эффузионных ячеек, 4 – основная заслонка, 5 – подложкодержатель, 6 – прецизионный манипулятор положения подложки, 7 – ростовая камера, 8 – ЗШУ, 9 – шибер, 10 – передающий манипулятор, 11 – смотровые окна, 12 – ионизационный манометр.

Прецизионный манипулятор 6 используется для управления положением монокристаллической подложки по отношению к молекулярным источникам. Точное позиционирование подложки необходимо для обеспечения однородности толщины и состава эпитаксиальных пленок, определяемых однородностью молекулярных пучков по площади подложки, т.е. соосностью расположения эффузионных ячеек и подложки. Для повышения однородности пленок в процессе эпитаксиального роста подложкодержатель вращается вокруг своей оси при помощи электродвигателя. Держатель подложки оборудован резистивным нагревателем и термопарой, которые обеспечивают поддержание заданной технологическим процессом температуры подложки в диапазоне от 300 до 650 °C с точностью ± 0.5 °C.

Установка ЦНА-24 обеспечивает поддержание в ростовой камере сверхвысокого вакуума порядка  $10^{-8}$  Па. Первичная откачка объемов установки с атмосферного давления до давления порядка  $10^{-4}$  Па осуществляется при помощи откачного поста ABO – 11, подключаемого к загрузочной камере и оборудованного форвакуумным насосом ВНР-55Д и турбомолекулярным насосом 01АБ-450-003. Первичная откачка с помощью откачного поста ABO-11 проводится после вскрытия установки при загрузке-выгрузке подложек и при

проведении регламентных и ремонтных работ. Дальнейшее снижение давления остаточных газов в установке осуществляется геттерным ионным магниторазрядным насосом НВГМ-5-1 (ростовая камера) и магниторазрядным насосом НМДИ-016-1 (загрузочная камера) при отсоединенном откачном посте ABO – 11. Для увеличения скорости откачки во время роста используются титановый сублимационный насос, который обеспечивает поглощение молекул и атомов остаточных газов на испаренных молекулах титана за счет хемосорбции. Дополнительную откачку в процессе МЛЭ обеспечивают криопанели 2, заполняемые жидким азотом, за счет физической адсорбции молекул остаточных газов, столкнувшихся со стенками криопанелей. Криопанели также обеспечивают тепловую изоляцию молекулярных источников.

Измерение давления в процессе проведения эпитаксиального роста или откачки ростовой и загрузочной камер осуществляется по показаниям двух вакуумметров ВМБ-1/8-001. Также давление можно приближенно оценивать по значениям токов на блоках питания геттерного магниторазрядного насоса НВГМ-5-1 (величина разрядного тока пропорциональна концентрации газа в вакуумной камере).

Качественный и количественный анализ остаточных газов в ростовой камере установки проводится при помощи квадрупольного масс-спектрометра Extort XT100(M), оснащенного вторичным электронным умножителем и способного детектировать атомы и молекулы газов с массой в диапазоне 1-100 а.е.м. Остаточная атмосфера ростовой камеры для установки "ЦНА-24" содержит в основном водород, оксид и диоксид углерода, легкие углеводороды -  $CH_n$ ,  $C_2H_n$ , азот  $N_2$ , водяной пар, аргон.

Измерение потоков элементов осуществляется при помощи ионизационного манометра Альперта — Байярда 12 с диапазоном измерений  $10^{-4} - 10^{-9}$  Торр. Зависимость молекулярного потока F от температуры нагрева источника имеет Аррениусовский вид:

$$F = \frac{A}{T^c} \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right),\tag{2.2}$$

где A, c – постоянные, T – температура источника в кельвинах,  $E_a$  – энергия активации. Обычно температурной зависимостью предэкспоненциального множителя пренебрегают. На рисунке 2.2 приведены характерные зависимости десятичного логарифма парциальных давлений  $\lg(P)$  элементов алюминия, галлия и индия от 1000/T для установки ЦНА-24. Данные температурные зависимости  $P_{Al}(T)$ ,  $P_{Ga}(T)$  и  $P_{In}(T)$  снимаются для калибровки в начале и в конце каждого ростового процесса, поскольку из-за расхода материала источников может наблюдаться постепенный уход потоков.

Калибровка (измерение) скоростей роста соединений GaAs и AlAs осуществлялось путем выращивания толстых эпитаксиальных слоев GaAs и AlAs на подложках GaAs при фиксированном значении давлений  $P_{\rm Ga}$  и  $P_{\rm Al}$ . Часть поверхности подложек GaAs во время роста

закрывается маской. По измерению с помощью контактного профилометра толщины эпитаксиального слоя на ступеньке, образующейся после удаления маски, и по известному времени роста  $t_{\rm pостa}$  определялись скорости роста соединений  $v_{\rm GaAs}$  и  $v_{\rm AlAs}$  при выбранном значении давлений  $P_{\rm Ga}$  и  $P_{\rm Al}$ .

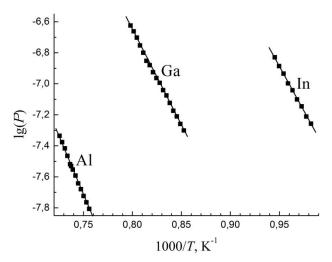


Рисунок 2.2 – График зависимости десятичного логарифма давлений алюминия, галлия и индия в потоке от обратной температуры источника

Калибровка скорости роста InAs осуществлялась путем выращивания на подложке InP толстых решеточно-согласованных с InP слоев  $In_{0.52}Al_{0.48}As$  и  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ . Скорости роста и состав тройных твердых растворов  $In_xGa_{1-x}As$  и  $In_yAl_{1-y}As$  при МЛЭ рассчитывались по следующим формулам:

$$v_{\text{InGaAs}} = v_{\text{InAs}} + v_{\text{GaAs}}, \tag{2.3}$$

$$x = v_{\text{InAs}}/(v_{\text{InAs}} + v_{\text{GaAs}}), \tag{2.4}$$

$$v_{\text{InAlAs}} = v_{\text{InAs}} + v_{\text{AlAs}}, \tag{2.5}$$

$$y = v_{InAs}/(v_{InAs} + v_{AlAs}). \tag{2.6}$$

Температуры источников Ga, Al и In выбирались такими, чтобы установившиеся потоки Ga, Al и In соответствовали стехиометрическому составу  $In_{0.53}Ga_{0.47}A/In_{0.52}Al_{0.48}As$  с учетом коэффициентов относительной чувствительности  $K_{Al}$  и  $K_{In}$  ионизационного манометра к различным молекулярным потокам:

$$v_{\text{AlAs}} = K_{\text{Al}} \cdot v_{\text{GaAs}} \cdot P_{\text{Al}} / P_{\text{Ga}}, \tag{2.7}$$

$$v_{\text{InAs}} = K_{\text{In}} \cdot v_{\text{GaAs}} \cdot P_{\text{In}} / P_{\text{Ga}}, \tag{2.8}$$

где  $K_{\rm Al} = 1.79$ ,  $K_{\rm In} = 0.7$ . Сооответствие составов InAlAs и InGaAs к решеточно — согласованным к InP значениям анализировалось рентгенодифракционными измерениями и методом спектроскопии  $\Phi \Pi$ .

В качестве примеси n-типа использовался кремний, который широко применяется для легирования мышьяковых твердых растворов AlGaInAs при МЛЭ. Предел растворимости

кремния в GaAs порядка  $8\cdot10^{18}$  см<sup>-3</sup>. Кремний при замещении элементов III группы создает в запрещенной зоне мелкий уровень приблизительно на 6 мэВ ниже края зоны проводимости. Калибровка концентрации легирования донорными примесями проводилась путем выращивания серии объемно-легированных Si эпитаксиальных слоев GaAs при различных температурах кремниевого источника. Затем измерениями вольт-фарадных характеристик и эффекта Холла определялись концентрация свободных электронов, которая изменялась от  $\sim 5\cdot10^{15}$  до  $6\cdot10^{18}$  см<sup>-3</sup>. Калибровочная кривая зависимости объемной концентрации электронов от температуры Si ячейки  $n(T_{\rm Si})$ , построенная в полулогарифмическом масштабе, являлась прямой линией до достижения концентрации  $5\cdot10^{18}$  см<sup>-3</sup> при которой проявлялся эффект насыщения концентрации из-за увеличения коэффициента самокомпенсации Si (часть атомов Si может встраиваться в подрешетку атомов As и проявлять в этом случае акцепторные свойства).

По определенным калибровочным зависимостям выбирались необходимые температуры источников Al, Ga, In, Si для выращивания экспериментальных HEMT наногетероструктур. Получаемые пластины демонстрировали высокую однородность концентрации  $n_{\rm S}$  и подвижности  $\mu_{\rm e}$  электронов по площади: в пределах 2/3 радиуса пластины от центра отклонение  $n_{\rm S}$  и  $\mu_{\rm e}$  не превышало 3 %, а на краях пластины значения  $n_{\rm S}$  и  $\mu_{\rm e}$  уменьшались приблизительно на 6 % относительно центра.

### 2.2 Методика определения концентрации и подвижности электронов

Подвижность  $\mu_e$  и концентрация  $n_s$  двумерного электронного газа в квантовой яме НЕМТ гетероструктуры определялись по стандартной методике путем измерений удельного сопротивления и эффекта Холла. На рисунке 2.3 представлена схема установки для определения электрофизических характеристик гетероструктур. При проведении измерений образец размещается на зондовом столе 1 и фиксируется четырьмя прижимными электрическими зондами 2. Зондовый стол имеет форму ванны для заливки жидкого азота и проведения измерений при температуре T=77 К. Постоянный магнит 3 (B=281 мТл) может выдвигаться и располагаться либо непосредственно над образцом, либо выводиться из зоны расположения образца. Крышка 4 используется для предотвращения во время измерений нежелательной засветки образца.

Переключение зондов, между которыми при проведении измерений подается ток и между которыми измеряется напряжение, осуществляется коммутатором тока и потенциалов 7. Ток, протекающий через образец, задается стабилизированным источником постоянного тока 5. Измерение напряжения между парами зондов, подключаемых к контактам образца, производится цифровым вольтметром 6 В7-34А.

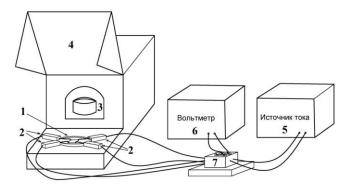


Рисунок 2.3 – Блок-схема установки измерения электрофизических параметров образцов

Предварительная подготовка образцов к измерениям заключалась в создании омических контактов, обеспечивающих линейность вольт-амперной характеристики для двух противоположных полярностей поданного напряжения и сопротивление которых значительно меньше сопротивления образца. Измерения электрофизических характеристик образцов проводились на меза-структурах в виде холловских мостиков (рисунок 2.4). Обозначенные на рисунке размеры: w = 70.5 мкм, l = 176 мкм, a = 35 мкм.

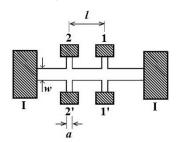


Рисунок 2.4 — Форма образцов и геометрия контактов при измерении концентрации и подвижности в гетероструктурах. Заштрихованные области — контактные площадки.

Меза-структуры изготавливались с применением фотолитографии и двух фотошаблонов [ 155 ]. С помощью первого фотошаблона на поверхности гетероструктур формировалась фоторезистивная маска с окнами для жидкостного травления меза-структур. После второй фотолитографии в окна фоторезиста методом вакуумного термического напыления наносились контактные площадки Ni/AuGe/Au, которые затем вжигались в атмосфере азота при температуре  $T = 400\,^{\circ}$ C в течении 3-5 минут.

Ток при измерениях подавался через контактные площадки I-I, холловское напряжение  $U_H$  в магнитном поле измерялось между контактами 1-1', по напряжению между контактами 1-2 ( $U_{12}$ ) без магнитного поля определяется слоевое удельное сопротивление  $\rho$ . Для компенсации термо-электродвижущей силы (ЭДС), вызванной различной температурой контактов образца, измерения проводятся при прямом и обратном направлении протекания тока, и вычисляется

полуразность измеренных напряжений. Расчет слоевого удельного сопротивления, концентрации и подвижности электронов проводится по следующим формулам [156]:

$$\rho = \frac{U_{12}}{I} \cdot \frac{w}{I},\tag{2.9}$$

$$n_{S} = \frac{1}{e} \cdot \frac{U_{H}}{IB},\tag{2.10}$$

$$\mu = \frac{1}{en_S \rho},\tag{2.11}$$

где w — ширина меза-структуры, l — расстояние между контактами 1-2.

В общем случае при определении электрофизических характеристик полупроводников путем измерения эффекта Холла, необходимо учитывать механизм рассеяния носителей заряда [157]. Концентрация и подвижность электронов, рассчитанные по формулам (2.10)-(2.11), называются холловскими и отличаются от реальных концентрации и дрейфовой подвижности в  $r_{\rm H}$  раз, где  $r_{\rm H}$  — Холл-фактор, безразмерный коэффициент, принимающий значения от 1 до 2 в зависимости от доминирующего механизма рассеяния. Так, при рассеянии электронов на ионах примеси  $r_{\rm H}$  = 1.93, на тепловых колебаниях решетки  $r_{\rm H}$  = 1.18. В вырожденных полупроводниках  $r_{\rm H}$  = 1 [158]. Так как ДЭГ в НЕМТ гетероструктурах является вырожденным (энергия Ферми ~100 мэВ), то в данной работе принималось значение Холл-фактора  $r_{\rm H}$  = 1.

Относительная погрешность измерения напряжения постоянного тока вольтметра B7-34A равна  $\pm$  [0.015+0.002·( $U_{\rm K}/U_{\rm X}-1$ )], где  $U_{\rm K}$  – предел измерения напряжения,  $U_{\rm K}$  – показание вольтметра и не превышает  $\pm$  0.3 %. Точность стабилизации тока около  $\pm$  1 %. Относительная погрешность определения электрофизических характеристик образцов с учетом других погрешностей (неоднородность магнитного поля, сопротивление контактов) при помощи описанной установки не превышает  $\pm$  3 %.

### 2.3 Спектроскопия фотолюминесценции

Исследование электронного спектра в HEMT гетероструктурах производилось при помощи измерений спектров  $\Phi$ Л образцов в диапазоне длин волн 650-2000 нм (энергий фотонов 0.6-1.9 эВ). На рисунке 2.5 приведена оптическая схема измерения спектров  $\Phi$ Л. Источником возбуждающего излучения является гелий-неоновый (He-Ne) лазер 1, генерирующий непрерывное излучение с длиной волны 6328 Å ( $\hbar\omega=1.96$  эВ) и мощностью до 50 мВт. При помощи системы зеркал 3 лазерный пучок под углом падения  $45^{\circ}$  направляется на исследуемый образец  $4^{\circ}$ , размещенный в азотном криостате 4. Охлаждение образца

осуществляется парами азота, его температура может изменяться в диапазоне  $77-300~\rm K$  с точностью стабилизации  $\pm 0.5~\rm ^\circ K$ .

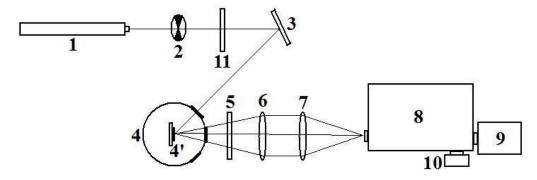


Рисунок 2.5 — Оптическая схема измерения спектров  $\Phi \Pi$ : 1 — He-Ne лазер, 2 — прерыватель пучка, 3 — зеркала, 4 — криостат, 4' — образец, 5 и 11 — светофильтры, 6 и 7 — линзы, 8 — монохроматор, 9 —  $\Phi$ ЭУ, 10 — фотодиод.

Площадь пятна фокусировки лазерного пучка на поверхности образца приблизительно составляет  $2 \cdot 10^{-4}$  см<sup>2</sup>, что соответствует плотности мощности накачки до 250 Bt/cм<sup>2</sup>. Для измерения спектров  $\Phi$ Л в зависимости от мощности накачки использовались нейтральные ослабляющие фильтры 11.

Поверхность образца располагается в фокальной плоскости собирающей линзы 6, поэтому линза 6 преобразует расходящийся пучок излучения ФЛ в коллимированный. Линза 7 фокусирует коллимированный пучок на входную щель монохроматора 8, расположенной в задней фокальной плоскости линзы 7.

Регистрация света в диапазоне длин волн 650 – 1200 нм (1.9 – 1.0 эВ) осуществлялась фотоэлектронным умножителем ФЭУ-62. Охлаждаемый жидким азотом ФЭУ работает в режиме счета импульсов, сигнал с ФЭУ предварительно усиливается усилителемдискриминатором и поступает на цифровой счетчик импульсов Novelec.

Для измерения спектров ФЛ в диапазоне 900 – 2000 нм (1,4 ÷ 0,6 эВ) использовался неохлаждаемый ріп-фотодиод Натават G8372-01 на основе InGaAs в режиме синхронного детектирования. Прерыватель потока 2 модулирует лазерный пучок с частотой 100 Гц и генерирует опорный сигнал в виде последовательности прямоугольных импульсов. Напряжение с ріп-фотодиода, а также опорный сигнал от прерывателя поступают на синхронный усилитель Princeton Applied Research model 128A, а затем интегрированный сигнал измеряется цифровым мультиметром Picotest M3500A. Измеряемые сигналы с фотоприемников корректировались с учетом их спектральных характеристик (коэффициентов чувствительности). На рисунке 2.6 приведены графики фоточувствительности для ріп-фотодиода и ФЭУ-62, из которых рассчитывались поправочные множители для спектров.

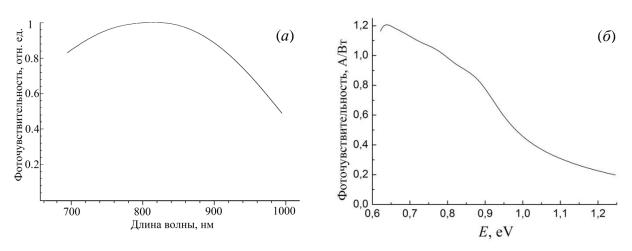


Рисунок 2.6 - Спектральные характеристики: *а*) ФЭУ-62, *б*) pin-фотодиода.

Монохроматор МДР-23У используется для выделения из спектров ФЛ узкого спектрального диапазона. Использовалась дифракционная решетка 600 штрихов/мм с рабочей областью 800 - 2000 нм и обратной линейной дисперсией 2.6 нм/мм. Ширины входной и выходных щелей монохроматора составляли 1.2 мм, что соответствует спектральной ширине выделяемой монохроматором линии в 3.12 нм (3.8 мэВ) для  $\lambda = 1000$  нм. Управление также сбор данных c фотоприемников осуществляется положением решетки, a автоматизированной программой на персональном компьютере. При измерении спектров ФЛ в диапазоне 1000 – 2000 нм в оптическую систему вводился светофильтр ИКС-5, который отсекал из спектров линии излучения в диапазоне  $\lambda < 1000$  нм. Эти линии пропускались монохроматором во втором порядке дифракции и оказывали паразитное влияние на измеряемую форму спектров ФЛ.

### 2.4 Просвечивающая электронная микроскопия

Исследование гетероструктур проводилось в просвечивающем растровом электронном микроскопе (ПЭМ) ТІТАN 80-300 (FEI, США), оснащенного корректором сферической аберрации зонда, в НИЦ «Курчатовский Институт». Измерения проводились в режимах светлого и темного поля, а также с использованием высокоуглового кольцевого детектора рассеянных электронов (Fischione, США) в режиме высокоразрешающей сканирующей ПЭМ. Ускоряющее напряжение составляло 300 кВ. Пространственное разрешение просвечивающего электронного микроскопа, определяемое длиной волны электронов и диаметром пятна фокусировки на образце, в режиме высокоуглового темнополевого измерения составляло 0.079 нм. Установка оснащена системами демпфирования колебаний и стабилизации температуры (±0.2 °/ч). Измерения толщин слоев гетероструктур осуществлялись непосредственно по

изображениям кристаллической решетки образцов путем подсчета количества кристаллических плоскостей с известным параметром решетки (в подложках GaAs или InP).

На рисунке 2.7 представлена схема получения изображений ПЭМ. Пучок высокоэнергетических электронов фокусируется на образец и осуществляет растровое сканирование по поверхности. В результате взаимодействия с атомами гетероструктуры электроный пучок, прошедший через образец, расщепляется: наблюдается дифракция электронов (когерентное рассеяние) и некогерентное рассеяние. Угол некогерентного рассеяния на порядок величины больше, чем для типичных дифракций Брэгга [159]. Большеугловое рассеяние происходит в том случае, если электрон проходит близко к ядру атомов в решетке и взаимодействует с ним. Вероятность этого рассеяния, называемого резерфордовским, пропорциональна  $\mathbb{Z}^R$ , где 1.5 < R < 2 [160]. Высокоугловое темнопольное исследование в просвечивающей электронной микроскопии — распространенный метод исследования наногетероструктур, позволяющий получать изображения с контрастом, зависящим от атомного номера  $\mathbb{Z}$  ( $\mathbb{Z}$ -контрастом) элементов в кристаллической решетке.

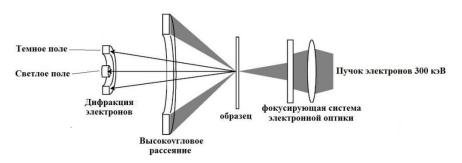


Рисунок 2.7 - Схема получения изображений в ПЭМ

Образец ориентируется таким образом, чтобы электронный пучок падал параллельно кристаллографическому направлению [1 -1 0]. Для кристаллов со структурой цинковой обманки (рисунок 2.8~a), к которым относятся твердые растворы  $A^{III}As$ , в проекции на плоскость, перпендикулярной направлению [1 -1 0], атомы выстраиваются в цепочки из элементов III группы и цепочки атомов мышьяка (рисунок  $2.8~\delta$ ). Каждый атом образца в цепочке в случае некогерентного рассеяния можно рассматривать как независимый рассеиватель. Контраст изображения в этом режиме зависит от среднего  $\langle Z^R \rangle$  в колонке атомов и толщины образца и не зависит от особенностей волновой интерференции, включая структурный фактор элементарной ячейки, присутствие запрещенных рефлексов и др. [161].

Поперечные срезы наногетероструктур были приготовлены стандартными методами. После механического утонения образца до толщин 20–40 мкм в ультрамикротоме Leica (США) следовало утонение при помощи ионов  $Ar^+$  в установке Gatan 691 PIPS (США) при ускоряющем

напряжении 5 кэВ. Полировка осуществлялась ионами  $Ar^+$  с понижением энергии пучка до 0.1 кэВ. Толщина исследуемых образцов (в направлении прохождения электронного пучка) составляла порядка 50-100 нм.

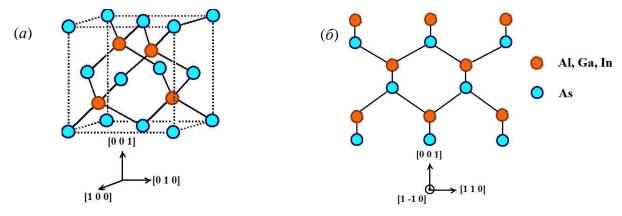


Рисунок 2.8 - Структура цинковой обманки: a – элементарная ячейка, б – изображение кристаллической решетки в проекции [1 -1 0]

### 2.5 Моделирование зонной структуры полупроводниковых гетероструктур

При анализе электронных свойств полупроводниковых гетероструктур полезной является информация об энергетическом спектре носителей заряда, получаемая на основе моделирования зонной структуры решением уравнения Шредингера. Так, положение линий ФЛ определяется энергиями состояний электронов и дырок, а форма линий – заполнением квантовых состояний и перекрытием ВФ.

В гетероструктурах квантовые состояния электронов и дырок определяются, в первую очередь, профилем потенциальной энергии, обусловленным чередованием полупроводниковых слоев с различными свойствами – положением энергетических зон, эффективными массами, диэлектрической проницаемостью. При легировании гетероструктур в потенциальную энергию носителей заряда дает вклад электростатическое взаимодействие с ионизированными примесями и между собой. Например, при высокой плотности электронов более  $10^{12}~{\rm cm}^{-2}~{\rm b}~{\rm K}{\rm J}$ электростатический происходит изгиб 30H И формируется потенциальный уменьшающий глубину квантовой ямы (рисунок 1.3), высота которого пропорциональна плотности электронов. Поэтому потенциал, определяющий квантовые состояния электронов и дырок, в МЛГ является функцией распределения плотности носителей заряда в КЯ и их концентрации. Это накладывает условие решения уравнения Шредингера самосогласованно с уравнением Пуассона с применением компьютерного численного расчета.

В качестве метода для решения уравнения Шредингера было выбрано приближение огибающей волновой функции на основе kp-метода [16]. В этом приближении в качестве базиса для разложения волновых функций электронов и дырок используются блоховские волны в

точках экстремумов энергетических зон полупроводников. Поэтому метод применим для моделирования энергетического спектра носителей заряда вблизи экстремумов энергетических зон и идеально подходит для расчета энергий и ВФ основных сотояний электронов и дырок в полупроводниковых гетероструктурах InGaAs/InAlAs, для оценки энергий межзонных переходов.

## 2.5.1 Моделирование зонной структуры полупроводниковых гетероструктур в приближении огибающей волновой функции

Электронный гамильтониан в кристаллическом твердом теле имеет вид [68]:

$$H = \sum_{i} \left[ \frac{\vec{p}_{i}^{2}}{2m_{0}} + V_{ion}(\vec{r}_{i}) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^{2}}{4\pi |\vec{r}_{i} - \vec{r}_{j}|}, \tag{2.12}$$

где  $m_0$  — масса свободного электрона, первое слагаемое описывает кинетическую энергию i электрона, второе — взаимодействие электрона с атомными остовами, третье — кулоновское электрон-электронное взаимодействие. В выражении (2.12) используется адиабатическое приближение, согласно которому при рассмотрении движения электронов атомные ядра, ввиду их большой массы, рассматриваются как неподвижные источники поля, действующего на электроны. В идеальном кристалле потенциал  $V_{ion}$  является периодической функцией координат:

$$V_{ion}(\vec{r} + \vec{R}) = V_{ion}(\vec{r}),$$
 (2.13)

где  $\vec{R}$  - вектор прямой решетки (трансляционной симметрии). Уравнение Шредингера с многочастичным гамильтонианом (2.12) слишком сложное для современных вычислительных средств и может быть решено только для малого числа частиц. Согласно теории функционала плотности [162, 163] задачу о движении взаимодействующих электронов в статическом внешнем поле  $V(\vec{r})$  можно свести к более простой задаче о независимых электронах, движущихся в некотором эффективном потенциале (самосогласованном поле). Хохенберг и Кон [162] доказали, что между внешним потенциалом, в котором движется многоэлектронная система, и плотностью электронов в основном состоянии существует взаимнооднозначное соответствие. Также они доказали вариационный принцип, согласно которому для системы взаимодействующих электронов, движущейся в потенциале  $V(\vec{r})$ , можно определить некоторый универсальный функционал электронной плотности  $F[n(\vec{r})]$  такой, что минимум выражения  $E \equiv \int V(\vec{r})n(\vec{r})d\vec{r} + F[n(\vec{r})]$  совпадает с энергией основного состояния системы. Затем Кон и Шэм показали [163], что из этого вариационного принципа можно вывести уравнения (уравнения Кона-Шэма), решение которых позволяет определить распределение плотности

 $n(\vec{r})$  и полную энергию электронной системы в основном состоянии. Уравнения Кона-Шэма имеют вид одноэлектронного уравнения Шредингера в приближении Хартри с дополнительным обменно-корреляционным слагаемым  $V_{XC}$ . Получаемые решением уравнений Кона-Шэма одноэлектронные волновые функции и уровни энергии обычно трактуются как квантовые состояния исследуемой системы, в том числе и в возбужденном состоянии (подробно это обсуждается в [164]). Одноэлектронный гамильтониан в теории функционала плотности и уравнения Кона-Шэма имеют вид:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V_{ion}(\vec{r}) + V[n(\vec{r})], \qquad H\Psi_n = E_n \Psi_n, \qquad n(\vec{r}) = \sum_{E_n < E_F} |\Psi^2_n(\vec{r})|.$$
 (2.14)

Можно показать [68], что потенциал  $V[n(\vec{r})]$ , является периодической функцией координат. Согласно теореме Блоха [54], собственные состояния одноэлектронного гамильтониана (2.14) с периодическим потенциалом можно выбрать таким образом, чтобы они имели форму плоской волны, умноженной на функцию с периодичностью потенциала:

$$\Psi_{nk}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{nk}(\vec{r}), \qquad u_{nk}(\vec{r}) = u_{nk}(\vec{r} + \vec{R}),$$
 (2.15)

где  $u_{nk}$  – функция Блоха. Подстановка ВФ (2.15) в уравнение (2.14) дает:

$$\left[\frac{(\vec{p} + \hbar \vec{k})^2}{2m_0} + V_{ion}(\vec{r}) + V[n(\vec{r})]\right] u_{nk}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) u_{nk}(\vec{r}). \tag{2.16}$$

Для каждого номера n собственные энергии  $E_n$  являются непрерывными функциями волнового вектора k в обратном пространстве, образуя энергетические зоны. Большинство электронных свойств полупроводников определяются параметрами носителей заряда, заполняющими состояния вблизи экстремумов зон — электронами в минимуме зоны проводимости, дырками в максимумах валентных зон. На этом основан (kp) - метод расчета зонной структуры полупроводников, в котором в качестве базиса для разложения волновых функций  $u_{nk}$  в окрестности точки экстремума  $k_0$  (в нашем случае  $k_0 = 0$ ,  $\Gamma$ -точка зоны Бриллюэна) используются блоховские функции  $u_{nk_0}$ , являющиеся собственными функциями уравнения (2.16) при  $k = k_0$ :

$$u_{nk}(\vec{r}) = \sum_{\nu} c_{n,\nu}(\vec{k}) u_{\nu k_0}(\vec{r}), \qquad (2.17)$$

Гамильтониан системы в базисе (2.17) принимает вид бесконечномерной матрицы:

$$H_{\nu,\mu} = \left[ E_{\nu}(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_0} (\vec{k} - \vec{k}_0)^2 \right] \delta_{\nu\mu} + \frac{\hbar}{m_0} (\vec{k} - \vec{k}_0) \vec{p}_{\nu\mu}, \tag{2.18}$$

где  $E_{\nu}(\vec{k}_0)$  - энергетическое положение края энергетической зоны с номером  $\nu$  при  $k=k_0,\ \delta_{\nu\mu}$  - символ Кронекера,  $\vec{p}_{\nu\mu}$  - матричный элемент оператора импульса между функциями  $u_{\nu k_0}$  и  $u_{\mu k_0}$ ,

недиагональная компонента гамильтониана, которая описывает взаимное влияние энергетических зон друг на друга. Обычно на свойства полупроводников оказывает влияние конечное число энергетических зон, в основном – зоны проводимости и валентные зоны, расположеные ближе всего к уровню Ферми. Поэтому на следующем шаге при помощи теории возмущений [165] гамильтониан (2.18) переписывают, делая его конечной размерности. Разделим энергетические зоны на две группы: к группе А отнесем те энергетические зоны (конечное число), которые участвуют в рассматриваемом физическом явлении, а к группе В – все остальные зоны. Если сделать предположение, что недиагональный матричный элемент гамильтониана (2.18) между зонами из групп А и В мал, и его можно рассматривать как возмущение [166], то гамильтониан системы принимает вид:

$$H_{\nu\mu}(\vec{k}) = E_{\nu}(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_0}(\vec{k} - \vec{k}_0)^2 + \frac{\hbar}{m_0}(\vec{k} - \vec{k}_0)\vec{p}_{\nu\mu} + \sum_{\nu \in B} \frac{H_{\nu\nu}(\vec{k})H_{\nu\mu}(\vec{k})}{E_{\nu}(\vec{k}_0) - E_{\nu}(\vec{k}_0)}, \quad (2.19)$$

где индексы v и  $\mu$  перечисляют только зоны, относящиеся к группе A. Матричные элементы  $\vec{p}_{\nu\mu}$  обычно используются как подгоночные параметры для согласования зонной структуры исследуемых полупроводников с экспериментально полученными результатами.

В зависимости от количества энергетических зон, выбранных в группу A, различают различные (kp)-модели. Для моделирования свойств полупроводниковых гетероструктур InGaAs/InAlAs широко используется приближение эффективной массы, в котором рассматривается только 1 зона проводимости. В тех случаях, когда кроме электронных квантовых состояний должны быть рассчитаны и состояния дырок, применяются многозонные модели — 8-зонная и 14-зонная. В приближении эффективной массы гамильтониан (2.19) принимает вид:

$$H(\vec{k}) = E_n(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_0}(\vec{k} - \vec{k}_0)^2 + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\gamma \neq n} \frac{|\vec{p}_{n\gamma}|^2}{E_n(\vec{k}_0) - E_{\gamma}(\vec{k}_0)} = E_n(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2}(\vec{k} - \vec{k}_0) \frac{1}{m^*}(\vec{k} - \vec{k}_0), \quad (2.20)$$

где  $1/m^*$  - тензор обратной эффективной массы. Гамильтониан (2.20) относится к бесконечному полупроводниковому кристаллу.

В гетероструктурах, состоящих из различных полупроводник, в уравнение Шредингера добавляется потенциал, связанный с различием потенциальной энергии носителей заряда в различных материалах, а также электростатические поля взаимодействия носителей заряда и заряженных примесей. При рассмотрении зонных диаграмм МЛГ на основе твердых растворов полупроводников InAs, GaAs и AlAs обычно используется однозонная модель эффективной массы, в которую входит рассмотрение состояний зоны проводимости вблизи  $\Gamma$ -точки зоны Бриллюэна. Уравнение Шредингера в поперечном направлении Z для огибающих  $B\Phi \psi_{ca}(z)$  электронов, тяжелых и легких дырок при k=0 (вблизи экстремума зоны) имеет вид [167]:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left( \frac{1}{m_{\alpha}^*(z)} \frac{d}{dz} \right) + V_{\alpha}(z) \right] \Psi_{\alpha i}(z) = E_{\alpha i} \Psi_{\alpha i}(z), \qquad (2.21)$$

где  $\hbar \approx 1.055 \cdot 10^{-34}$  Дж·с – приведенная постоянная Планка,  $\alpha = e, hh, lh$  обозначает электроны, тяжелые дырки и легкие дырки,  $m_{\alpha}^*(z)$  – зависящая от координаты эффективная масса,  $E_{ci}$  - энергия i-й подзоны размерного квантования,  $V_{\alpha}(z)$  - потенциальная энергия носителей заряда. Разделение в уравнении (2.21) валентной зоны на зону легких и тяжелых дырок возможно только при расчете энергии краевых состояния валентной зоны, обладающих нулевым продольным квазиимпульсом [167]. При  $k \neq 0$  в гамильтониане (2.19) недиагональные (kp)-члены не равны нулю, поэтому смешивание состояний легких и тяжелых дырок должно оказывать существенное влияние на спектр.

Для электронов потенциал  $V_e(z)$  имеет вид:

$$V_{e}(z) = -e\varphi_{H}(z) + V_{XC}(z) + \Delta E_{e}(z),$$
 (2.22)

где  $\varphi_H(z)$  - электростатический потенциал Хартри в одноэлектронном приближении,  $V_{XC}(z)$  - обменно-корреляционная поправка в кулоновском взаимодействии электронов,  $\Delta E_e(z)$  - слагаемое, описывающее разрывы края зоны проводимости на гетерограницах.

Граничные условия для огибающих ВФ на гетеропереходе обеспечивают сохранение числа частиц при переходе через гетерограницу. На гетерогранице (расположенной в плоскости  $z = z_0$ ) должны быть непрерывны огибающая ВФ и ее производная, деленная на массу:

$$\Psi_{\alpha i}(z)\Big|_{z-z_0=-0} = \Psi_{\alpha i}(z)\Big|_{z-z_0=+0}, \quad \frac{1}{m_{\alpha}^*(z)} \frac{d\Psi_{\alpha i}(z)}{dz}\Big|_{z-z_0=-0} = \frac{1}{m_{\alpha}^*(z)} \frac{d\Psi_{\alpha i}(z)}{dz}\Big|_{z-z_0=+0}. \quad (2.23)$$

Распределение электростатического потенциала  $\varphi_{\rm H}(z)$  в гетероструктурах с заданным распределением заряда  $\rho(z)$  определяется уравнением Пуассона:

$$\nabla (\varepsilon(z)\nabla \varphi_H(z)) = -4\pi \rho(z), \qquad (2.24)$$

где  $\varepsilon(z)$  — статическая диэлектрическая проницаемость. Распределение плотности заряда  $\rho(z)$  в ключает в себя плотность свободных электронов n(z) в КЯ, концентрации заряженных примесей — ионизированных доноров  $N_{\rm D}^{+}(z)$ , а также плотности объемных или двумерных зарядов  $\rho_{\rm fix}(z)$ , имеющих иную природу (например, заряд поверхностных состояний):

$$\rho(z) = e(-n(z) + N_D^+(z)) + \rho_{fir}(z). \tag{2.24}$$

Плотность ионизированных мелких доноров определяются положением уровней энергии примесей по отношению к уровню Ферми  $E_F$  по следующей формуле:

$$N_D^+(\vec{r}) = \frac{N_D(z)}{1 + 2\exp((E_F - E_D(z))/kT)},$$
(2.25)

где  $E_D(z)$  — зависящее от координаты положение уровней энергии доноров и акцепторов, k — постоянная Больцмана, T — температура (в кельвинах). Множитель 2 в знаменателе формулы 2.25 учитывает спиновое вырождение состояний донорных центров. Пространственная зависимость положений уровней энергии доноров  $E_D(z)$  относительно уровня Ферми объясняется изгибом зон. Положение уровня Ферми в системе определяется из условия полной электронейтральности системы — интеграл от плотности заряда (2.24), взятый по всему объему рассматриваемой системы должен быть равен нулю.

Пространственное распределение электронной плотности определяется следующим выражением:

$$n(z) = \frac{m_{\parallel}^*}{\pi \hbar^2} kT \sum_{i} \ln \left( 1 + \frac{E_F - E_i}{kT} \right) \Psi_i^2.$$
(2.26)

Эффективная масса электронов в плоскости слоев  $m_{\parallel}^*$  в гетероструктуре отличается от эффективной массы электронов в объемных полупроводниках, поскольку электрон пространственно локализуется в нескольких полупроводниковых слоях с различающейся эффективной массой. В этом случае продольная эффективная масса определяется усреднением эффективных масс электрона в различных слоях гетероструктуры с весовой функцией, равной квадрату волновой функции электрона:

$$\frac{1}{m_{\parallel i}^*} = \int \frac{1}{m^*(z)} \Psi_i^2(z) dz. \tag{2.27}$$

Таким образом, продольная эффективная масса электронов зависит от номера подзоны размерного квантования.

Обменно-корреляционная поправка  $V_{XC}(z)$  в уравнении (2.22) основывается на теории функционала плотности.  $V_{XC}(z)$  вводится в уравнение Шредингера для учета многочастичных эффектов электрон-электронного взаимодействия. Потенциал  $V_{XC}$  в общем случае является неизвестным функционалом электронной плотности n(z). Для расчета электронных состояний в полупроводниковых гетероструктурах широко используется приближение локальной плотности, в котором значение обменно-корреляционной энергии в точке пространства с плотностью n(z) принимается равным энергии многоэлектронного взаимодействия в однородной электронной системе с плотностью n(z) п приближении локальной плотности использовалась параметризация из работы [168]:

$$V_{yC}(z) = V_{x}(z) + V_{C}(z),$$
 (2.28)

$$V_X(z) = -\left(\frac{9}{4\pi^2}\right)^{1/3} \frac{1}{r_s(z)} R y^*, \qquad (2.29)$$

$$V_{C}(z) = \begin{cases} \gamma \left(1 + \frac{7}{6}\beta_{1}\sqrt{r_{S}(z)} + \frac{4}{3}\beta_{2}r_{S}(z)\right) / \left(1 + \beta_{1}\sqrt{r_{S}(z)} + \beta_{2}r_{S}(z)\right)^{2}Ry^{*}, & r_{S}(z) > 1, \\ \left(A \ln r_{S}(z) + (B - \frac{A}{3}) + \frac{2}{3}Cr_{S}(z) \ln r_{S}(z) + \frac{1}{3}(2D - C)r_{S}(z)\right)Ry^{*}, & r_{S}(z) < 1, \end{cases}$$

$$(2.30)$$

$$r_S(z) = \frac{1}{a_B^*} \left( \frac{3}{4\pi n(z)} \right)^{1/3}, \qquad a_B^* = 4\pi \varepsilon_0 \frac{\hbar^2}{e^2} \frac{\varepsilon}{m^*}, \qquad Ry^* = \frac{e^4}{(4\pi \varepsilon_0 \hbar)^2} \frac{m^*}{\varepsilon^2},$$
 (2.31)

где  $m_e$  — масса свободного электрона,  $m^*$  - эффективная масса,  $\varepsilon$  — статическая диэлектрическая проницаемость. Безразмерные параметры  $\gamma$ ,  $\beta_1$ ,  $\beta_2$  и A — D приведены в таблице 2.1.

Таблица 2.1 - Коэффициенты параметризации корреляционного ротенциала  $V_{\rm C}(z)$  [168]

γ	$eta_1$	$eta_2$	A	В	C	D
- 0.1423	1.0529	0.3334	0.0311	-0.048	0.0020	-0.0116

Уравнение Шредингера для дырок аналогично уравнению для электронов (2.21), за исключением того, что в данное уравнение в качестве потенциала входит пространственный профиль валентной зоны. Он рассчитывается из пространственного профиля края зоны проводимости по известным значениям ширины запрещенной зоны полупроводников. В модулированно-легированных донорами гетероструктурах InGaAs/InAlAs, рассматриваемых в данном разделе, концентрация электронов на много порядков выше концентрации дырок и распределение потенциала в основном определяется электронами. Поэтому уравнение Шредингера для электронов решается самосогласованно с уравнением Пуассона, а затем решается уравнение Шредингера для тяжелых и легких дырок с электростатическим потенциалом, определенным из распределения электронов.

В данной работе решение системы уравнений (2.21-2.31) проводились с использованием вычислительных средств программы моделирования полупроводниковых гетероструктур Nextnano3 [169]. Программа обладает встроенным решателем самосогласованной системы уравнений Шредингера и Пуассона и обеспечивает широкую возможность управления процессом вычисления, в том числе, выборе физических моделей, а также алгоритма расчета. Последовательность расчета представляет итерационную процедуру. На первом шаге задается начальное распределение заряда в системе и решается уравнение Пуассона для определения электростатического потенциала. Затем рассчитывается пространственный профиль края зоны проводимости V(z) и решается уравнение Шредингера, из которого определяются уровни энергии электронов  $E_i$  и их волновые функции. Затем определяется распределение плотности заряда, подставляемое в уравнение Пуассона. Вычисления проводятся циклически до достижения сходимости, при которой результат следующей итерации близок к результату предыдущей. Программа позволяет задавать произвольную геометрию гетероструктур,

состоящих из слоев различной толщины и состава, а также изменять параметры модели — тип уравнения Шредингера, учет электростатического потенциала, температуры, упругих напряжений — и определять параметры математического расчета — алгоритм решения системы уравнения Шредингера и Пуассона, задавать сетку, количество итераций и точность расчета.

Решения уравнения Шредингера для дырок используется в данной работе в основном для определения энергетического положения краев подзон тяжелых и легких дырок для оценки энергии межзонной излучательной рекомбинации, наблюдаемой при  $\Phi$ Л гетероструктур. Энергия межзонной излучательной рекомбинации оценивалась по разности энергий уровней размерного квантования электронов  $E_{ei}$  и дырок  $E_{hj}$  по следующей формуле:

$$\hbar\omega = E_{ei} - E_{hi} \tag{2.32}$$

Вероятность соответствующих переходов оценивалась как квадрат интеграла перекрытия  $|M|^2$  огибающих волновых функций электронов и дырок [170]:

$$M_{ij} = \int \psi_{ei} \psi_{hj} dz. \tag{2.33}$$

Для уменьшения затрачиваемого при расчетах компьютерного времени решение уравнения Шредингера искалось не в пределах всей моделируемой гетероструктуры, а в специально выделенной области, называемой квантовой. Квантовая область включала КЯ InGaAs и окружающие ее барьерные слои InAlAs толщиной приблизительно 15 нм, достаточной для полного затухания ВФ электронов и дырок, локализованных внутри ямы. На границах квантовой области  $z_1$  и  $z_2$  на ВФ носителей заряда  $\Psi_{\alpha i}(z)$  накладывались граничные условия Дирихле:

$$\Psi_{ci}(z_1) = \Psi_{ci}(z_2) = 0. \tag{2.34}$$

Кроме граничных условий на ВФ носителей заряда, для решения уравнения Пуассона накладывались граничные условия на электростатический потенциал. Левое граничное условие (на поверхности гетероструктуры в точке Z<sub>1</sub>) на электростатический потенциал обусловлено существованием поверхностных состояний, которые стабилизируют уровень Ферми (пиннинг уровня Ферми) на уровне поверхностных состояний. Пиннинг уровня Ферми вблизи середины запрещенной зоны на границе полупроводника с металлом, диэлектриком или атмосферой связан с существованием интерфейсных состояний [171] на поверхности полупроводника. Доля поверхностных состояний по отношению к количеству поверхностных атомов заметно превышает долю примесей и дефектов в объеме полупроводника [172], что приводит к заполнению поверхностных состояний, фиксации уровня Ферми на уровне поверхностных состояний и истощению поверхности полупроводника. Поэтому поверхностные состояния играют значительную роль в формировании зонного профиля в гетероструктурах, приводя к образованию поверхностного электрическиого поля. Пиннинг уровня Ферми может зависеть от

ориентации поверхности, от режима ее обработки, морфологии, состава атмосферы. В  $In_xGa_{1-x}As$  величина поверхностного потенциала, отсчитанная от края зоны проводимости, зависит от содержания In и равна (в 9B) [173]:

$$U_s = -0.03 + 0.05 \cdot (1 - x) + 0.95 \cdot (1 - x)^2. \tag{2.35}$$

При x > 0.85 уровень Ферми в  $In_xGa_{1-x}As$  закрепляется выше края зоны проводимости (отсутствует поверхностный барьер). Для твердого раствора  $In_{0.53}Ga_{0.47}As\ U_S = 0.2$  эВ. Из-за поверхностных состояний на потенциал на поверхности полупроводника (координата  $Z_1$ ) накладывается граничное условие Дирихле:

$$E_{\rm C}(Z_1) = U_{\rm S}.$$
 (2.36)

Так как все энергетические величины при расчетах отсчитываются от уровня Ферми, то из этого условия автоматически следует, что уровень Ферми на поверхности закрепляется на уровне поверхностных состояний  $U_S$ .

Граничное условие на потенциал на правой границе гетероструктуры, вообще говоря, зависит от состава, толщины и легирования буферного слоя, а также от типа (полуизолирующая, легированная) подложки. Эпитаксиальные слои InAlAs, которые используются в роли буфера для HEMT структур на подложках InP и MHEMT структур на GaAs, характеризуются низкой плотностью ненамеренных примесей (не более  $10^{15}$  см<sup>-3</sup>, p тип). В полуизолирующих подложках уровень Ферми  $E_{\rm F}$  расположен вблизи середины запрещенной зоны. В легированных железом подложках  $InP\ E_F$  фиксируется на акцепторном уровне Fe, расположенном на 0.6 эВ ниже края зоны проводимости InP [174]. Так как в КЯ присутствует ДЭГ, а в подложке InP – акцепторные уровни, расположенные ниже по энергии, то часть электронов из КЯ диффундирует в подложку. В результате перераспределения заряда между подложкой и КЯ в буферном слое InAlAs образуется электрическое поле, которое препятствует дальнейшему переходу электронов в подложку и способствует установлению единого химического потенциала по всей системе в равновеии. Поэтому для потенциала на нижней границе гетероструктуры  $Z_2$  (граница буфер InAlAs-подложка) для структур на InP использовалось граничное условие Дирихле:  $E_{\rm C}({\rm Z}_2) = 0.84$  эВ, рассчитанное как сумма положения уровня железа относительно зоны проводимости в InP (0.6 эВ) и величины разрыва зоны проводимости  $\Delta E_{\rm C}$  на границе  $In_{0.52} Al_{0.48} As/InP (0.24 эB)$ .

Подложки GaAs являются полуизолирующими за счет низкой концентрации примесей, и низкой плотности свободный носителей заряда (особенно, при температуре T = 77 K). Поэтому можно считать, что подложка GaAs и буфер InAlAs не приводят к существенному перераспределению носителей заряда в MHEMT гетероструктурах, и электрическое поле стремится к нулю при удалении от КЯ, в соответствии с теоремой Гаусса. Для потенциала на

нижней границе  $Z_2$  МНЕМТ гетероструктур на подложках GaAs использовалось граничное условие Неймана:  $\mathrm{d} \varphi_H/\mathrm{d} z$  ( $Z_2$ ) = 0.

Описанная модель неоднократно и успешно применялась в литературе для анализа свойств и особенностей ДЭГ в КЯ НЕМТ-наногетероструктур на основе соединений (In,Ga,Al)As [175-184]. Следует отметить, что при моделировании электронного спектра МЛГ, содержащих узкозонные полупроводники, например InAs, необходимо учитывать непараболичность закона дисперсии электронов в зоне проводимости [185]. При высокой плотности электронов в КЯ порядка  $10^{12}$  см<sup>-2</sup>, содержащей узкозонные слои InAs, энергия Ферми электронов может составлять порядка 50 мэВ. С учетом энергии размерного квантования электроны на уровне Ферми в таких МЛГ будут обладать энергий более чем на 100 мэВ выше края зоны проводимости InAs. Из-за непараболичности зоны проводимости эффективная масса этих электронов существенно выше, чем у дна зоны. Непараболичность закона дисперсии приводит к тому, что плотность состояний в двумерной системе не является строго ступенчатой функцией, а возрастает в зависимости от энергии. Поэтому пренебрежение непараболичностью дисперсии электронов приводит к переоценке энергии Ферми, а также положения уровней размерного квантования, в особенности – возбужденных [185]. Несмотря на систематическую погрешность, использование данной модели для МЛГ, содержащих слои InAs, позволяет определить тенденции зависимостей энергий и ВФ носителей заряда от состава и слоев гетероструктуры.

## 2.5.2 Зонная структура тройных твердых растворов InGaAs и InAlAs и гетероструктур на их основе

Система полупроводниковых твердых растворов на основе арсенидов – AlGaAs, InGaAs и InAlAs – в зависимости от состава демонстрирует широкий диапазон свойств и параметров. Твердые растворы  $In_xGa_{1-x}As$  и  $In_xAl_{1-x}As$  имеют кристаллическую структуру цинковой обманки. Периоды решетки GaAs и AlAs близки по величине – 5.6533 Å и 5.6614 Å ( $T=300~{\rm K}$ ), а период кристаллической решетки InAs составляет 6.0583 Å [186]. Для параметра решетки твердых растворов InGaAs и InAlAs выполняется эмпирическое правило Вегарда [187] о линейной зависимости при заданной температуре между параметром a кристаллической решётки сплава  $A_xB_{1-x}$  и концентрацией отдельных его компонентов x:

$$a_{AB}(x) = x \cdot a_A + (1 - x) \cdot a_B.$$
 (2.37)

Параметр решетки  $In_xGa_{1-x}As$  и  $In_xAl_{1-x}As$  линейно увеличивается вместе с увеличением доли x InAs в твердом растворе. У твердых растворов  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$  и  $In_{0.52}Al_{0.48}As$  параметр решетки совпадает с параметром решетки InP (a=5.8690 Å), поэтому подложки InP чаще всего используются для роста гетероструктур на основе  $In_xGa_{1-x}As/In_vAl_{1-v}As$  с  $x, y \approx 0.5$ .

В таблице 2.2 приведены значения ширины запрещенной зоны, эффективной массы электронов и тяжелых дырок, статической диэлектрической проницаемости для бинарных соединений GaAs, AlAs и InAs. Все параметры были взяты из обзорных работ [186] и [188] и цитированной в них литературы. Так как экспериментальные измерения для соответствующих параметров существуют не для всех составов твердых растворов, то используются интерполяционные схемы. Линейные зависимости, аналогичные выражению (2.37), позволяют вычислить эффективные массы носителей и диэлектрическую проницаемость. Зависимость ширины запрещенной зоны от состава твердого раствора  $A_x B_{1-x}$  демонстрирует нелинейность, которую описывают введением квадратичного слагаемого:

$$E_{g AB}(x) = x \cdot E_{g A} + (1 - x) \cdot E_{g B} - c \cdot x \cdot (1 - x),$$
 (2.38)

где  $E_{\rm g~A}$  и  $E_{\rm g~B}$  — ширина запрещенной зоны соединений A и B при одной температуре, c — параметр изгиба, который равен 0.72 эВ для InAlAs и 0.58 эВ для InGaAs. Температурная зависимость ширины запрещенной зоны описывается эмпирическим выражением Варшни:

$$E_{g}(T) = E_{g}(T=0) - \frac{\alpha T^{2}}{T+\beta},$$
 (2.39)

где  $E_{\rm g}~(T=0)$  — ширина запрещенной зоны при  $T \to 0$  K,  $\alpha$  и  $\beta$  — параметры.

Таблица 2.2 Параметры зонной структуры соединений GaAs, AlAs и InAs, а также твердых растворов  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$  и  $In_{0.52}Al_{0.48}As$ , используемые для модельных расчетов

	GaAs	InAs	AlAs	$In_{0.53}Ga_{0.47}As$	$In_{0.52}Al_{0.48}As$
a, Å	5.6533	6.0583	5.6614	5.861	5.861
$E_g(T=0)$ , $\ni B$	1.519	0.417	3.01	0.82	1.53
α, мэВ/К	0.5405	0.276	0.885	-	-
β, К	204	93	530	-	-
$m_{e}(\Gamma)$	$0.067m_{0}$	0.024 m <sub>0</sub>	0.124 m <sub>0</sub>	0.043	0.069
$m_{hh}(\Gamma)$	$0.33 \ m_0$	$0.26 \ m_0$	$0.51 \ m_0$	0.293	0.38
$m_{lh}(\Gamma)$	$0.09 \; m_0^{}$	0.027 m <sub>0</sub>	$0.18 \ m_0$	0.057	0.10
3	12.9	15.2	10.1	14.1	12.7
$c_{11}$ , ГПа	122.1	83.29	125	-	-
$c_{12}$ , ГПа	56.6	45.26	53.4	-	-
$a_C$ , эВ	- 9.36	- 6.66	- 7.4	-	-
$a_V$ , э $\mathrm{B}$	1.21	1	1.53	-	-
<i>b</i> , эВ	- 2	- 1.8	- 2.3	-	-
$\Delta_0$ , $3B$	0.341	0.39	0.28	0.33	0.30
γ1	7.1	20.4	3.76	11.01	12.2
$\gamma_2$	2.02	8.3	0.9	4.18	4.81
γ3	2.91	9.1	1.42	4.84	5.47

На рисунке 2.9 представлена зависимость ширины запрещенной зоны в  $\Gamma$ -точке зоны Бриллюэна  $E_{\rm g}^{\ \Gamma}$  от параметра решетки для мышьяковых твердых растворов при  $T\approx 0$  K. В

гетероструктурах на основе системы твердых растворов  $In_xGa_{1-x}As/In_xAl_{1-x}As$  более широкозонный InAlAs используется в качестве барьера, а узкозонный InGaAs - в качестве квантовой ямы, в которой локализуется ДЭГ. InGaAs также характеризуется существенно большими транспортными характеристиками – подвижностью и максимальной дрейфовой скоростью электронов.

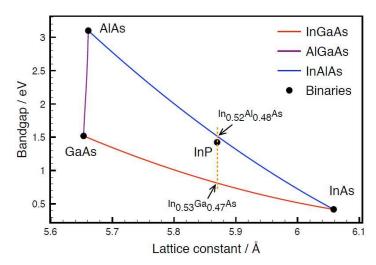


Рисунок 2.9 — Зависимость ширины запрещенной зоны  $E_{\rm g}^{\ \Gamma}$  от параметра решетки для мышьяковых тройных твердых растворов при  $T \approx 0$  К.

 $In_xGa_{1-x}As$  является прямозонным полупроводником во всем диапазоне составов x. В InGaAs двукратно вырожденный (с учетом спина) минимум зоны проводимости и четырехкратно вырожденный максимум валентной зоны (с учетом спина и зон легких и тяжелых дыок) находятся в  $\Gamma$ -точке зоны Бриллюэна. Так как GaAs и InAs являются прямозонными, а AlAs — непрямозонным (с минимумом зоны проводимости в точках X зоны Inx0 соединениями, то твердые растворы Inx1 Inx2 и Inx3 при некотором содержании Inx3 являются непрямозонными: Inx4 Inx4 Inx5 при Inx4 Inx5 при Inx6 Inx6

В окрестности  $\Gamma$ -минимума зоны проводимости закон дисперсии электронов полупроводников  $A^{III}B^V$  является изотропным и параболическим [189]. Энергия электронов E связана с модулем квазиволнового вектора k следующим соотношением:

$$E = E_C + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}. (2.40)$$

Максимум валентной зоны полупроводников семейста  $A^{III}As$  также располагается в Гточке зоны Бриллюэна. Энергетический спектр дырок в окрестности экстремума имеет следующий вид:

$$E^{\pm}(\vec{k}) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \left\{ A \pm \left[ B^2 + \frac{C^2}{k^4} (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_x^2 k_z^2) \right]^{1/2} \right\}, \tag{2.41}$$

$$E_{SO}(\vec{k}) = -\Delta_0 - \frac{\hbar^2}{2m_0} Ak^2, \qquad (2.42)$$

где знаки + и — в выражении 2.41 соответствуют зонам тяжелых и легких дырок, SO — отщепленная за счет спин-орбитального взаимодействия валентная зона,  $\Delta_0$  — энергия спин-орбитального отщепления, A, B и C — безразмерные параметры, характеризующие дисперсию валентных зон полупроводников. Они связаны с параметрами Кона-Латтинжера  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  и  $\gamma_3$  следующими выражениями:

$$\gamma_1 = A, \qquad \gamma_2 = -\frac{B}{2}, \qquad \gamma_3 = -\frac{1}{2}(B^2 + \frac{C^2}{3})^{1/2}$$
 (2.43)

Эффективная масса тяжелых и легких дырок зависит от кристаллографического направления. Вдоль направления (1 0 0):

$$m_{hh}^* = \frac{m_0}{\gamma_1 - 2\gamma_2}, \qquad m_{lh}^* = \frac{m_0}{\gamma_1 + 2\gamma_2}.$$
 (2.44)

В данной работе в качестве эффективных масс дырок использовались значения, рассчитанные по формуле (2.43), поскольку для получения гетероструктур обычно используются подложки GaAs и InP с ориентацией поверхности (1 0 0).

Величина разрыва зоны проводимости  $\Delta E_{\rm C}$  в МЛГ является важным параметром, определяющим концентрацию ДЭГ и локализацию электронов в КЯ. При разработке конструкции МЛГ выбирают гетеропары с большим  $\Delta E_{\rm C}$ . К сожалению, величины  $\Delta E_{\rm C}$  и  $\Delta E_{\rm V}$  в эксперименте определяются неявно и с большой погрешностью, причем измерения существуют для некоторых пар материалов. При моделировании электронных свойств гетероструктур на основе полупроводников III-V важное значение для определения разрывов зон играет эмпирическое правило транзитивности [190,191]:

$$\Delta E_{v}(A/C) = \Delta E_{v}(A/B) + \Delta E_{v}(B/C), \qquad (2.45)$$

где A, B, C – различные полупроводники, знак "/" обозначает гетеропереход. Правило транзитивности, как было подтверждено в модельных расчетах из первых принципов методом функционала плотности [192], позволяет расположить энергии краев валентных зон различных полупроводников III-V на одной шкале и отсчитывать их от единого уровня. Правило транзитивности выполняется с высокой степенью точности (порядка 50 мэВ) для идеальных (резких) гетерограниц. Для некоторых классов гетеропереходов, например, границ между полупроводниками IV группы и А<sup>III</sup>В<sup>V</sup> или между полупроводниковыми твердыми растворами без общих катионов или анионов, может происходить перемешивание атомных плоскостей и образование переходных слоев на гетерогранице. Такое перемешивание может приводить к образованию двумерных электростатических диполей, приводящих к сдвигу энергетических зон, который чувствителен к стехиометрии гетерограницы [193]. Образование переходных

слоев и нерезких гетерограниц может приводить к некоммутативности гетерограниц, при которой  $\Delta E_{\rm v}({\rm A}/B) \neq \Delta E_{\rm v}({\rm B}/{\rm A})$ . Одним из примеров таких гетеропереходов является  ${\rm In}_{0.52}{\rm Al}_{0.48}{\rm As}/{\rm InP}$ , для которого из-за особенностей технологии эпитаксии профили химического состава для прямой и обратной гетерограницы могут отличаться [194]. В случае гетероструктур на основе полупроводниковых твердых растворов, содержащих общий анион As —  ${\rm InGaAs}/{\rm InAlAs}$ ,  ${\rm InAs}/{\rm InGaAs}$  и  ${\rm GaAs}/{\rm InGaAs}$ , правило (2.44) выполняется независимо от ориентации подложки [195].

В решеточно-согласованных гетеропереходах  $In_xGa_{1-x}As/In_xAl_{1-x}As$  для расчета величины разрыва зоны проводимости при x>0.35 (когда  $In_xAl_{1-x}As$  является прямозонным) применимо правило  $\Delta E_{\rm C}=0.7\cdot\Delta E_{\rm g}$ . Максимальное значение разрыва зоны проводимости составляет 0.7 эВ при  $x\approx0.35$  [ 196 ], и  $\Delta E_{\rm C}$  монотонно уменьшается с ростом x. Для гетеропары  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$   $\Delta E_{\rm C}=0.51$  эВ.

Рассмотрим сдвиг краев зоны проводимости и валентных зон в псевдоморфном эпитаксиальном слое полупроводника под действием упругих напряжений [197]. Обозначим  $a_0$  — параметр решетки полупроводника, который отличается от параметра решетки подложки  $a_s$ . Пусть толщина эпитаксиального слоя меньше критической толщины. Под действием биаксиальных напряжений в плоскости роста продольный  $a_{\parallel}$  (параллельный границе раздела подложка-напряженный слой) параметр решетки этого слоя будет равным параметру подложки  $a_s$ , а поперечный параметр решетки  $a_{\perp}$  будет отличаться от  $a_0$  и определяться коэффициентами упругости. Изменение элемента объема твердого тела при деформации можно описать при помощи тензора деформации  $u_{ij}$  [198]. Тетрагональные деформации напряженного слоя в случае ориентации подложки (1 0 0) характеризуются тензором  $u_{ij}$  следующего вида [199, 200]:

$$u_{ij} = \begin{pmatrix} u_{\parallel} & 0 & 0 \\ 0 & u_{\parallel} & 0 \\ 0 & 0 & u_{\perp} \end{pmatrix}, \tag{2.46}$$

где  $u_{\parallel}$  - двухосное напряжение в плоскости слоя и  $u_{\perp}$  - одноосное напряжение в направлении, перпендикулярном границе подложка/эпитаксиальный слой, которые равны:

$$u_{\parallel} = \frac{a_{\parallel} - a_0}{a_0} = \frac{a_S}{a_0} - 1, \tag{2.47}$$

$$u_{\perp} = -2\frac{c_{12}}{c_{11}}u_{\parallel},\tag{2.48}$$

где  $c_{12}$  и  $c_{11}$  – постоянные жесткости эпитаксиального слоя. Смещение энергетических зон в полупроводниках под действием упругих напряжений можно описать при помощи деформационных потенциалов [201]. Гидростатическая деформация приводит к изменению ширины запрещенной зоны полупроводника – сдвигам края зоны проводимости  $E_{\rm C}$  и

однородному смещению краев валентных зон — легких  $E_{\rm lh}$  и тяжелых  $E_{\rm hh}$  дырок и спинорбитально отщепленной зоны  $E_{\rm SO}$ :

$$\Delta E_C^{zuop} = a_C \left( 2u_{\parallel} + u_{\perp} \right), \tag{2.49}$$

$$\Delta E_V^{zu\partial p} = a_V \left( 2u_{\parallel} + u_{\perp} \right), \tag{2.50}$$

где  $a_C$ ,  $a_V$  – деформационные потенциалы для зоны проводимости и валентной зоны, соответственно.

Сдвиговая деформация приводит к смещению краев валентных зон и не влияет на положение зоны проводимости. Так как величина энергетического смещения для зон легких и тяжелых дырок отличается, то сдвиговая деформация приводит к снятию вырождения валентной зоны в нулевой точке зоны Бриллюэна [202] (формулы приведены для ориентации подложки (1 0 0):

$$\Delta E^{c\partial uz} = 2b(u_{\parallel} - u_{\parallel}), \tag{2.51}$$

$$\Delta E_{hh}^{c\partial guz} = -\frac{1}{2} \Delta E^{\text{CДВИГ}}, \qquad (2.52)$$

$$\Delta E_{lh}^{c\partial \textit{GUZ}} = -\frac{1}{2}\Delta_0 + \frac{1}{4}\Delta E^{\textit{CZBU}\Gamma} + \frac{1}{2}[\Delta_0^2 + \Delta_0 \cdot \Delta E^{\textit{CZBU}\Gamma} + \frac{9}{4}(\Delta E^{\textit{CZBU}\Gamma})^2]^{1/2}, \tag{2.53}$$

где b — тетрагональный сдвиговый деформационный потенциал,  $\Delta_0$  — расстояния от края валентной зоны до края спин-орбитально отщепленной зоны в отсутствие упругих напряжений. Положение краев зон  $E^{\text{напр}}$  в упруго напряженном полупроводнике рассчитывается исходя из положения краев зон в ненапряженном полупроводнике  $E^{\text{ненапр}}$  и рассчитанных сдвигов зон под действием упругих напряжений:

$$E_C^{\text{Hanp}} = E_C^{\text{Henanp}} + \Delta E_C^{\text{2udp}}, \qquad (2.54)$$

$$E_{hh}^{\text{\tiny Hanp}} = E_{hh}^{\text{\tiny Henanp}} + \Delta E_{V}^{\text{\tiny Euop}} + \Delta E_{hh}^{\text{\tiny Cobsuz}}, \qquad (2.55)$$

$$E_{lh}^{\text{\tiny Heanp}} = E_{lh}^{\text{\tiny Heanp}} + \Delta E_{V}^{\text{\tiny Fuop}} + \Delta E_{lh}^{\text{\tiny Cobsuz}}. \tag{2.56}$$

Ширина запрещенной зоны упруго сжатого полупроводника (например, InAs на подложке InP) увеличивается, а упруго растянутого (GaAs на InP) – уменьшается по сравнению с недеформированным случаем [203].

Рассчитаем сдвиги краев энергетических зон в слоях InAs и GaAs под действием упругих напряжений, возникающих при их введении в КЯ In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As/In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As на подложке InP. В напряженном слое InAs компоненты тензора деформаций имеют значения  $u_{\parallel} = -0.0326$  и  $u_{\perp} = 0.0354$ . Соответствующие смещения краев зон  $\Delta E_{\rm C} = 0.199$  эВ,  $\Delta E_{\rm hh} = 0.093$  эВ,  $\Delta E_{\rm lh} = -0.067$  эВ.

В напряженном GaAs компоненты тензора деформаций имеют противоположный знак:  $u_{\parallel}=0.0367$  и  $u_{\perp}=-0.0340$ . Соответственно, смещения краев зон в GaAs происходят в

противоположную InAs сторону:  $\Delta E_{\rm C} = -0.369$  эB,  $\Delta E_{\rm hh} = -0.094$  эB,  $\Delta E_{\rm lh} = 0.262$  эВ. Приведенные величины находятся в количественном согласии с результатами работы [204], в которой из первых принципов методом сильной связи были рассчитаны разрывы зон в напряженных гетеросистемах  $A^{\rm III}B^{\rm V}$ , а также с результатами измерений разрывов зон из работы [205]. На рисунке 2.10 приведена зонная схема взаимного положения краев зон в полупроводниках InAs, GaAs, In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As и In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As.

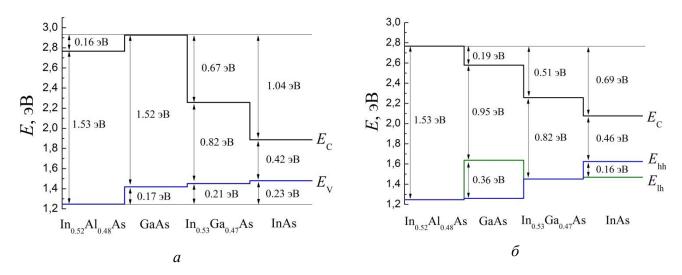


Рисунок 2.10 - Взаимное расположение краев энергетических зон в  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ ,  $In_{0.52}Al_{0.48}As$  и GaAs и InAs: a) без напряжений,  $\delta$ ) с учетом сдвигов зон под действием напряжений

# Глава 3. Расчет электронного спектра модулированно-легированных гетероструктур InAlAs/InGaAs

 $MЛГ In_xGa_{1-x}As/In_vAl_{1-v}As$  являются многослойными структурами, электронные свойства которых сложным образом зависят от толщин и составов всех слоев гетероструктуры. Так, концентрация и подвижность электронов в КЯ In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/In<sub>v</sub>Al<sub>1-v</sub>As МЛГ зависят от толщины КЯ [206] и толщины спейсера [207], расстояния от КЯ до поверхности гетероструктуры [83], содержания индия х в КЯ [208], профиля и степени легирования барьерного слоя [209], а также использования многослойных КЯ [210]. Это объясняется тем, что состояния электронов в КЯ МЛГ определяются не только глубиной и шириной потенциальной ямы в КЯ, но также и электрическими полями, создаваемыми ионизированными примесями, электронами и поверхностными состояниями. Так, при высокой плотности ДЭГ  $n_S$  порядка (2-3)·10<sup>12</sup> см<sup>-2</sup> в центре КЯ из-за электростатического отталкивания электронов происходит изгиб зон в виде потенциального барьера параболической формы, высота которого зависит от  $n_S$  и может составлять несколько десятков мэВ. Ионизированные доноры в барьере притягивают электроны, нарушая сииметричность потенциала в КЯ, а при высокой степени легирования в области примесей может сформироваться потенциальная яма, глубина которой сравнима с глубиной КЯ InGaAs/InAlAs. Эта потенциальная яма влияет на энергию и область локализации электронов и может привести к локализации электронов в области доноров, что нежелательно. Таким образом, квантовые электронные состояния в МЛГ сложным самосогласованным образом зависят от конструкции гетероструктуры и пространственного распределения заряда. Поэтому для моделирования электронного спектра таких структур должна использоваться уравнений Шредингера-Пуассона, решение которой система должно определяться самосогласованным образом.

В данной главе приведены результаты моделирования зонной структуры одностороннелегированных квантовых ям  $In_xGa_{1-x}As/In_yAl_{1-y}As$  и исследования влияния вариации параметров конструкции МЛГ  $In_xGa_{1-x}As/In_yAl_{1-y}As$  (состава и толщин слоев) на энергии и волновые функции электронов и дырок, концентрацию электронов и энергии межзонных оптических переходов в КЯ. Расчеты проводились для температуры T = 77 К.

На основании анализа литературных источников была определена характерная конструкция гетероструктур  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ , которая наиболее часто используется для получения НЕМТ транзисторов для диапазона частот свыше 100 ГГц. В таблице 3.1 представлена схема базовой гетероструктуры. Односторонне  $\delta$ -легированная ( $N_D = 5 \cdot 10^{12}$  см<sup>-2</sup>, толщина спейсера 4 нм) гетероструктура состоит из КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  толщиной 20 нм, размещенной на буферном слое  $In_{0.52}Al_{0.48}As$  (500 нм). Контактный слой  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ 

является нелегированным. Однородно по объему структуры присутствует фоновое ненамеренное легирование p-типа с концентрацией примесей  $10^{15}$  см<sup>-3</sup>. Во всех последующих расчетах за основу будет принята эта базовая МЛГ, если это не оговорено.

	Состав	Толщина, нм	Примеси	
			п-тип	р-тип
Контактный слой	In <sub>0.53</sub> Ga <sub>0.47</sub> As	10	-	
Барьерный слой	In <sub>0.52</sub> Al <sub>0.48</sub> As	15	-	
δ-легирование	-	-	$5.10^{12} \text{ cm}^{-2}$	$10^{15}  \text{cm}^{-3}$
Спейсер	In <sub>0.52</sub> Al <sub>0.48</sub> As	4	-	10 CM
Канал	In <sub>0.53</sub> Ga <sub>0.47</sub> As	20	-	
Буфер	Ino 52Alo 48As	500	_	

Таблица 3.1 – Толщина и состав слоев базовой гетероструктуры InGaAs/InAlAs

На рисунке 3.1 представлены результаты рассчета зонной структуры КЯ базовой кострукции. Уровень Ферми на графиках является точкой отсчета энергии и совпадает с 0 эВ. Ниже уровня Ферми расположены две электронные подзоны размерного квантования с концентрацией электонов  $n_1$  и  $n_2$ , соответственно,  $2.29 \cdot 10^{12}$  и  $0.75 \cdot 10^{12}$  см<sup>-2</sup>.

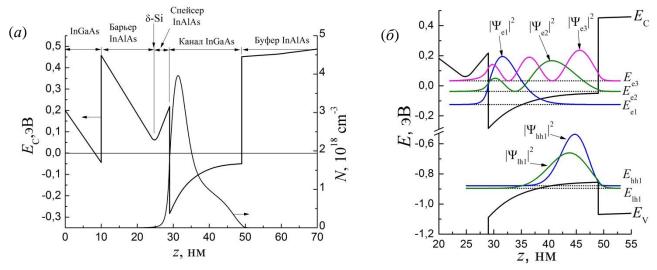


Рисунок 3.1 – Зонная структура КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  базовой конструкции: a – профили зоны проводимости  $E_C$  и электронной плотности N,  $\delta$  - квадраты волновых функций  $|\Psi|^2$  и положение уровней размерного квантования  $E_i$  для электронов (e) и дырок (hh, lh)

Потенциал КЯ из-за одностороннего легирования является асимметричным. Электростатическое поле положительно заряженных доноров в  $\delta$ -слое легирования притягивает электроны и приводит к смещению центроида ДЭГ в КЯ к верхней гетерогранице. Если рассматривать волновые функции электронов  $\Psi_{ei}$  (рисунок 3.1  $\delta$ ), то у верхней гетерограницы локализована только первая подзона размерного квантования, а вторая и более высокие подзоны имеют В $\Phi$ , распространяющиеся на всю толщину КЯ. Легкие и тяжелые дырки,

напротив, локализуются вблизи нижней гетерограницы. Это нарушение симметрии в распределении электронов и дырок в КЯ под действием электрического поля доноров приводит к снятию правил отбора по четности на межзонные оптические переходы, которые действуют в прямоугольных квантовых ямах. Интеграл перекрытия ВФ электронов и дырок  $|M_{e1-hh1}|^2 = 0.021$  становится существенно меньше интеграла перекрытия  $|M_{e2-hh1}|^2 = 0.572$ , что должно приводить к большей интенсивности линии ФЛ, связанной с оптическими переходами с участием электронов с подзоны e2 по сравнению с e1.

В валентной зоне самой верхней является подзона тяжелых дырок hh1, затем на 18 мэВ ниже располагается подзона lh1. Спектр тяжелых дырок характеризуется набором уровней с энергетическим расстоянием между ними порядка 25-30 мэВ. Для легких дырок уровень lh2 расположен на 60 мэВ, а уровень lh3 – на 130 мэВ ниже lh1. Из-за большей эффективной массы и, следовательно, плотности состояний, вероятность оптических переходов с участием тяжелых дырок больше, чем с участием легких. Поэтому в дальнейших расчетах при оценке положения линий межзонной рекомбинации будет использоваться энергия подзоны  $E_{hh1}$ . Более высокие подзоны дырок с номерами i > 1 также не будут рассматриваться, так как из-за осциллирующего характера огибающих ВФ этих подзон интеграл перекрытия с ВФ электронов  $|M_{ei-hi}|^2$  близок к нулю.

# 3.1 Влияние концентрации легирования на электронный спектр в квантовых ямах $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$

Рассчитаем зависимость зонных диаграмм НЕМТ-наногетероструктур  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  от дозы легирования (двумерной концентрации ионизированных примесей  $N_D$  в дельта-слое) от 0 до  $9\cdot10^{12}$  см<sup>-2</sup>. Конструкция гетероструктур совпадает с базовой (таблица 3.1). На рисунке 3.2 представлены зависимости зонного профиля  $E_C(z)$ , распределения электронов по слоям гетероструктуры N(z) и по подзонам  $n_i$  в зависимости от концентрации примесей. Рассчитанная слоевая концентрация электронов  $n_S$  зависит линейно от  $N_D$ . При  $N_D < 6\cdot10^{12}$  см<sup>-2</sup> в КЯ заполнены две подзоны размерного квантования, а при  $N_D > 6\cdot10^{12}$  см<sup>-2</sup> начинает заполняться третья подзона, при этом зависимость концентрации электронов в первой подзоне  $n_1$  от  $N_D$  замедляется.

При увеличении  $N_D$  возрастает электрическое поле доноров, в результате чего максимум электронной плотности в КЯ смещается ближе к верхней гетерогранице КЯ. Одновременно возрастает глубина V-образной потенциальной ямы дельта-слоя для электронов. При  $N_D \sim 6 \cdot 10^{12} \; {\rm cm}^{-2}$  дно V-ямы пересекает уровень Ферми, а при больших концентрациях  $N_D$  рядом с КЯ InGaAs/InAlAs формируется туннельно-связанная V-образная потенциальная яма сравнимой

глубины. Влияние этой потенциальной ямы на ВФ электронов зависит от энергии подзон  $E_i$ : если дно V-ямы расположено ниже энергии подзоны  $E_i$ , то в области дельта-слоя у ВФ  $|\Psi_i|^2$  формируется локальный максимум. Если соответствующая подзона  $E_i$  заполнена электронами, то тогда часть ДЭГ локализуется в области  $\delta$ -слоя и наблюдается параллельная проводимость. Частичная локализация электронов в  $\delta$ -слое приводит к росту рассеяния на ионизованных примесях и флуктуациях твердого раствора барьера InAlAs и, следовательно, к резкому снижению подвижность ДЭГ, поскольку рассеяние на ионизованных примесях является одним из основных механизмов рассеяния в МЛГ InGaAs/InAlAs на InP.

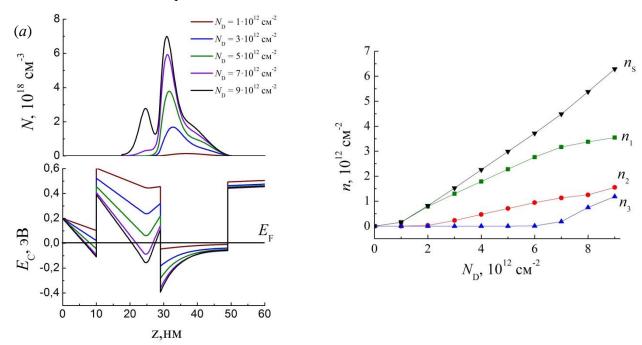


Рисунок 3.2 — Зависимость от концентрации  $\delta$ -легирования в МЛГ In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As/In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As: a - пространственного профиля края зоны проводимости  $E_{\rm C}$  и электронной плотности  $N, \delta$  — двумерной концентрации электронов  $n_i$  в подзонах размерного квантования.

Определим долю P плотности ДЭГ, локализованной в верхнем барьере InAlAs:

$$P = \frac{\int N(z)dz}{n_S},\tag{3.1}$$

где интеграл берется от объемной концентрации электронов N(z) по поперечной координате z в областях спейсера и верхнего барьера InAlAs гетероструктуры. Величина P характеризует формирование параллельного проводящего слоя в области легирования. P монотонно увеличивается с ростом  $N_D$ , в момент появление параллельной проводимости при  $N_D = 6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$  P превышает 5 %. Одновременно начинается заполнение третьей подзоны размерного квантования.

На рисунке 3.3 (*a*) представлен график зависимости энергий межзонных переходов в КЯ InGaAs/InAlAs от слоевой концентрации электронов  $n_{\rm S}$ . При малой  $n_{\rm S}$  энергия перехода  $\hbar\omega_{e1\text{-}hh1}$  близка к ширине запрещенной зоны In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As и отличается от нее на величину энергии размерного квантования электронов и дырок. При возрастании  $n_{\rm S}$  усиливается несимметричность потенциала КЯ, происходит наклон зонного профиля гетероструктуры. При этом линии рекомбинации  $\hbar\omega_{ei\text{-}hh1}$  смещаются в сторону меньших энергий, в диапазоне концентраций  $n_{\rm S}$  (0.5 - 3.5)·10<sup>12</sup> см<sup>-2</sup> зависимость является линейной. Отклонение от линейной зависимости наблюдается в момент заполнения электронной подзоны *e*3.

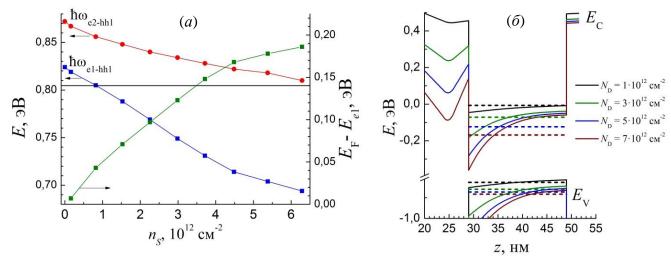


Рисунок 3.3 — Зависимость зонной структуры  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  КЯ толщиной 20 нм от  $N_D$ : a) энергий межзонных переходов  $\hbar\omega_{ei-hh1}$  и энергии Ферми  $E_F$ - $E_{e1}$  в подзоне e1,  $\delta$ ) профилей энергетических зон  $E_C$  и  $E_V$  и положения уровней энергии e1 и hh1

Смещение энергий переходов при изменении дозы легирования  $N_D$  напоминает квантоворазмерный эффект Штарка в прямоугольных КЯ [211,212]: при прикладывании поперечного электрического поля в КЯ происходит смещение уровней электронов и дырок, приводящее к уменьшению энергии межзонной рекомбинации. Зависимость смещения энергии межзонного перехода от напряженности электрического поля F для нелегированных КЯ имеет квадратичный вид  $\Delta E \sim F^2$ . Наклон валентной зоны и зоны проводимости в электрическом поле ведёт к пространственному разделению зарядов, уменьшению интеграла перекрытия, и, следовательно, уменьшение темпов межзонной рекомбинации.

Рассчитаем электрическое поле, которое действует на ДЭГ в МЛГ. Используя теорему Гаусса, несложно показать, что электрическое поле, создаваемое бесконечной заряженной плоскостью с двумерной плотностью заряда  $\sigma$  и перпендикулярной оси Z, равно:

$$F(z) = \frac{\sigma}{2\varepsilon_0} \operatorname{sgn}(z - z_0), \tag{3.2}$$

где sgn(z) – функция знака аргумента (1, если z > 0 и -1, если z < 0),  $z_0$  – координата расположения заряженной плоскости. Из (3.2) следует, что электрическое поле F бесконечной плоскости не зависит от расстояния до этой плоскости. В моделируемых гетероструктурах электрически заряженными являются следующие области: слой легирования с двумерной плотностью  $eN_{\rm D}$ , поверхностные состояния с плотностью  $-e(N_{\rm D}-n_{\rm S})$  (из условия полной электронейтральности), а также область ДЭГ с плотностью -ens (зарядом на границе с подложкой InAlAs/InP пренебрегаем). ДЭГ не сосредоточен в одной плоскости, а распределен по толщине КЯ. Для расчета электрического поля, создаваемого ДЭГ, разобьем толщину КЯ на тонкие слои dz. Каждый слой – плоскость с плотностью заряда -eN(z)dz, создающая электрическое поле, согласно (3.2). Если рассмотреть какую-то точку z вне области локализации ДЭГ, то тогда электрические поля, создаваемые всеми слоями dz в этой точке, будут иметь один знак. Тогда суммарное электрическое поле ДЭГ вне области локализации электронов эквивалентно электрическому полю одной плоскости, в которой сосредоточен весь заряд ДЭГ:  $\sum (-eN(z)dz) = -en_S$ . Аналогично, можно рассчитать и электрическое поле примесей, расспределнных по некоторому объему. Просуммировав вклады от трех перечисленных областей заряда, найдем, что электрическое поле F вблизи верхней гетерограницы КЯ равно:

$$F = en_{S}/\varepsilon\varepsilon_{0}. \tag{3.3}$$

Для плотности электронов  $n_{\rm S}=10^{12}~{\rm cm}^{-2}~F=7.1\cdot10^6~{\rm B/m}$ . Можно заключить, что электрическое поле, действующее на ДЭГ в односторонне МЛГ, пропорционально плотности электронов. Отсюда и из рисунка 3.3 a следует, что смещение линии межзонной рекомбинации является линейной функцией электрического поля, действующего на электроны, в случае экранирования поля ДЭГ в отличие от классического эффекта Штарка для КЯ. В рассматриваемом случае поперечное электрическое поле создается  $\delta$ -слоем примесей. При увеличении  $N_{\rm D}$  увеличивается поле, но одновременно возрастает плотность электронов  $n_{\rm S}$  в КЯ, которые (это основное отличие от эффекта Штарка для КЯ) экранируют это поле.

Смещение линий межзонной рекомбинации при изменении электрического поля, обусловлено перемещением электронов и дырок к противоположным границам КЯ и соответствующим уменьшением энергии рекомбинации. Поэтому можно ожидать, что этот эффект будет зависеть от толщины КЯ. На рисунке 3.4 приведены результаты расчета зонной структуры узкой КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  толщиной 10 нм при вариации концентрации легирования  $N_D$ . Видно, что наклон зависимости энергий рекомбинации  $\hbar\omega_{ei-hh1}$  от  $N_D$  для узкой ямы существенно меньше, чем для широкой.

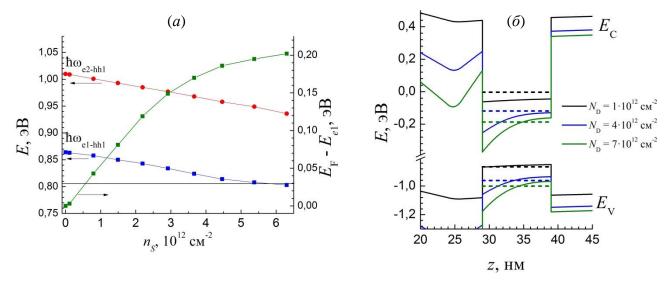


Рисунок 3.4 — Зависимость зонной структуры КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  толщиной 10 нм от  $N_D$ : a) энергий межзонных переходов  $\hbar\omega_{ei-hh1}$  и энергии Ферми  $E_F$ - $E_{e1}$  в подзоне e1,  $\delta$ ) профилей энергетических зон  $E_C$  и  $E_V$  и положения уровней энергии e1 и hh1

На рисунках 3.3 и 3.4 (*а*) приведены зависимости энергии Ферми электронов в первой подзоне размерного квантования от суммарной слоевой концентрации электронов в КЯ  $n_S$ . Видно, что в широком диапазоне  $n_S$  от 0 до  $4\cdot10^{12}$  см<sup>-2</sup> энергия Ферми линейно зависит от  $n_S$ . Согласно (1.6), существует линейная связь между концентрацией электронов в i-й двумерной подзоне  $n_i$  и энергией Ферми в этой подзоне. В МЛГ при изменении плотности ДЭГ происходит изменение формы потенциала, и, следовательно, смещение уровней энергии  $E_i$ , которое зависит от номера i. Поэтому, вообще говоря, характер зависимостей положения подзон  $E_i$  с различными номерами i от  $n_S$  может различаться. В том случае, когда в КЯ заполненными являются несколько подзон размерного квантования, связь между энергией Ферми электронов в подзоне e1 и суммарной плотностью электронов  $n_S$  может быть нелинейной. Поэтому возможность оценки концентрации ДЭГ в КЯ по полуширине пиков ФЛ (что рассмотрено в литературном обзоре) с несколькими заполненными электронными подзонами требует обоснования.

В случае гетероструктур с КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  шириной 10 и 20 нм моделирование показывает, что в широком диапазоне концентраций электронов от 0 до  $4\cdot10^{12}$  см<sup>-2</sup> наблюдается линейная связь между  $n_S$  и шириной полосы энергий  $E_F$ - $E_{e1}$ , которую заполняют электроны. Это подтверждает применимость ФЛ для оценки концентрации электронов в КЯ в указанном диапазоне  $n_S$ . При дальнейшем увеличении  $n_S$  возрастает глубина V-образной потенциальной ямы  $\delta$ -слоя, начинается заполнение 3-й подзоны размерного квантования и зависимость  $E_F$ - $E_{e1}$  от  $n_S$  замедляется, теряет линейность.

На рисунке 3.5 приведена зависимость вероятности рекомбинации электронов и дырок  $M_{ei-hh1}$  от плотности ДЭГ в КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  разной толщины. При нулевой плотности ДЭГ потенциал КЯ является прямоугольным, поэтому действуют правила отбора на межзонные оптические переходы по четности. При увеличении плотности ДЭГ интеграл перекрытия  $M_{el-hh1}$  монотонно снижается из-за пространственного разделения электронов в первой подзоне и тяжелых дырок в КЯ. Одновременно возрастает вероятность перехода с участием второй электронной подзоны  $M_{e2-hh1}$ . Характер зависимостей  $M_{ei-hh1}(n_S)$  определяется толщиной КЯ: в яме толщиной 20 нм переходы с участием 1 подзоны маловероятны при  $n_S$  более  $3\cdot10^{12}$  см<sup>-2</sup>, а в узкой яме 10 нм разделению электронов и дырок препятствуют гетерограницы, в результате чего переходы с участием 1 подзоны электронов могут наблюдаться при любой  $n_S$ .

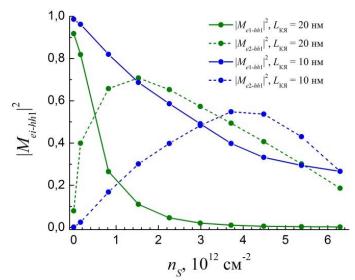


Рисунок 3.5 — Зависимость квадрата интеграла перекрытия ВФ электронов и дырок  $M_{ei\text{-}hh1}$  от слоевой концентрации электронов  $n_S$  в КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  толщиной 10 и 20 нм

# 3.2 Влияние толщины квантовой ямы $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ на спектр двумерного электронного газа

Толщина КЯ влияет на энергию размерного квантования ДЭГ локализованного в КЯ, т.е. энергетическое положение уровней различных подзон электронов относительно уровня Ферми. Уменьшение ширины ямы приводит к пространственному ограничению движения электронов в поперечном направлении и увеличению их энергии. На рисунке 3.6 представлена зависимость зонных диаграмм и заполнения электронных подзон от толщины КЯ  $L_{QW}$ . Суммарная концентрация ДЭГ  $n_S$  от толщины КЯ при фиксированной плотности ионизированных доноров практически не зависит. С другой стороны, при изменении толщины КЯ наблюдается заметное изменение концентрации электронов в подзонах размерного квантования, т.е. перекачка

электронов между подзонами. При малой толщине ямы заполнена только первая подзона размерного квантования, а более высокие по энергии подзоны пусты, т.к. в узкой КЯ энергия уровней этих подзон существенно выше уровня Ферми. При толщине  $L_{QW} = 9$  нм начинает заполняться вторая подзона, при этом плотность электронов в первой снижается.

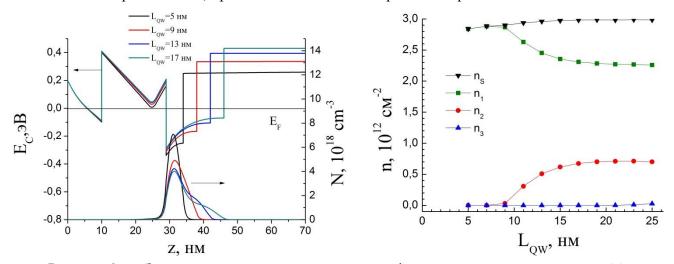


Рисунок 3.6 — Зависимость пространственного профиля края зоны проводимости (a) и электронной концентрации  $n_i$  в подзонах ( $\delta$ ) от толщины КЯ  $L_{QW}$ 

При  $L_{QW}=5$  нм распределение электронной плотности имеет колоколообразный вид с шириной распределения заряда порядка ширины ямы, центроид электронной плотности расположен в центре ямы. Изгиб зон и электрическое поле доноров незначительно влияет на распределение электронов. При увеличении  $L_{QW}$  в распределении электронов рядом с основным пиком появляется плечо, соответствующее электронной плотности второй подзоны. Электроны в основном локализованы у верхней границы. При увеличении  $L_{QW}$  более 20 нм ДЭГ практически не доходит до нижней гетерограницы КЯ, и распределение электронной плотности определяется треугольным потенциалом, создаваемым донорами у верхней гетерограницы. В этих условиях нижняя граница не оказывает влияния на состояния электронов и наблюдается насыщение зависимости концентрации  $n_i$  от  $L_{QW}$ .

Увеличение количества заполненных подзон при увеличении ширины ямы должно негативно сказаться на подвижности электронов из-за возникновения межподзонного рассеяния, а также более сильного туннельного проникновения электронной плотности второй подзоны в область барьеров и дельта-слоя. С другой стороны, в узкой КЯ существенным является рассеяние на шероховатостях границ, неоднородностях состава барьеров InAlAs и ионизированных примесях из-за увеличения доли электронной плотности в барьерах. Параметр P монотонно увеличивается при уменьшении  $L_{QW}$  из-за выталкивания ВФ электронов в барьеры.

Зависимость энергии электрон-дырочной межзонной рекомбинации от толщины ямы представлена на рисунке 3.7. Рассчитанные существенные сдвиги энергий рекомбинации от толщины ямы объясняются изменением энергии размерного квантования электронов и дырок.

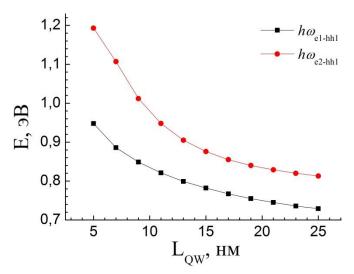


Рисунок 3.7 – Зависимость энергии переходов в МЛГ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  от  $L_{OW}$ 

#### 3.3 Влияние состава квантовой ямы $In_xGa_{1-x}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ на электронный спектр

При увеличении содержания InAs x в KЯ In $_x$ Ga $_{1-x}$ As/In $_{0.52}$ Al $_{0.48}$ As уменьшается эффективная масса электронов и ширина запрещенной зоны InGaAs. Также увеличивается величина разрыва зоны проводимости  $\Delta E_C$  на гетерогранице In $_x$ Ga $_{1-x}$ As/In $_{0.52}$ Al $_{0.48}$ As. Однако изза рассогласования решетки твердого раствора In $_x$ Ga $_{1-x}$ As (x > 0,53) и барьера In $_{0.52}$ Al $_{0.48}$ As слой КЯ является напряженным. Рассчитаем зависимость зонных диаграмм псевдоморфных МЛГ при вариации состава x КЯ In $_x$ Ga $_{1-x}$ As при изменении x от 0.53 до 0.80. Значения x больше 0.80 не рассматриваются из-за малой критической толщины слоя In $_x$ Ga $_{1-x}$ As.

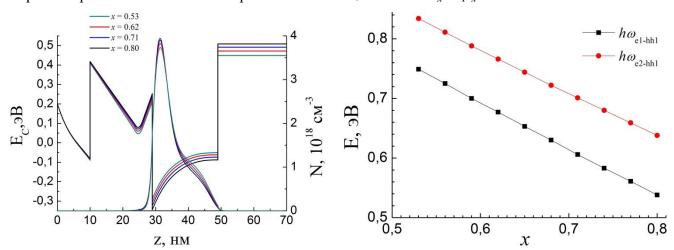


Рисунок 3.8 – Зависимость от содержания индия x в КЯ  $\ln_x$  Са<sub>1-x</sub> Аѕ (a) - пространственного профиля зоны проводимости и электронной концентрации, ( $\delta$ ) – энергий межзонных переходов.

С ростом x в КЯ происходит монотонное уменьшение параметра P. Это объясняется усилением локализации электронов в КЯ из-за увеличения разрыва зоны проводимости  $\Delta E_C$ . На рисунке 3.8 приведена эволюция профилей зоны проводимости и концентрации электронов при изменении x. Качественно форма профилей распределения электронов для гетероструктур с разным составом КЯ отличается слабо, но количественно наблюдается монотонное снижение амплитуды хвостов ВФ электронов в барьерах (параметр P).

Энергии межзонных оптических переходов в КЯ монотонно уменьшаются с ростом x (рисунок 3.8). Это уменьшение соответствует изменению ширины запрещенной зоны напряженного твердого раствора  $In_xGa_{1-x}As$ .

### 3.4 Влияние толщины спейсера на зонную структуру $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$

Толщина спейсера  $L_{\rm sp}$  является одним из основных параметров конструкции МЛГ InGaAs/InAlAs, определяющим концентрацию и подвижность ДЭГ. Нелегированный спейсер вводится в гетероструктуру для пространственного разделения области локализации электронного газа и области распределения заряженных примесей.

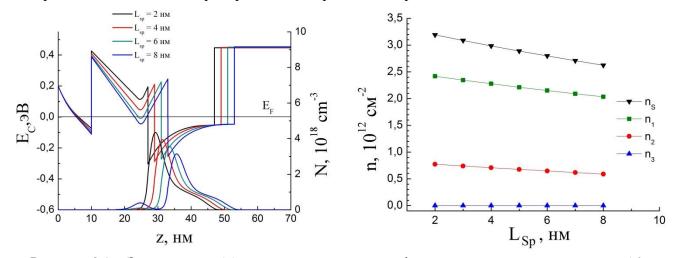


Рисунок 3.9 — Зависимости (a) пространственного профиля края зоны проводимости и ( $\delta$ ) электронной концентрации от толщины спейсера  $L_{sp}$ 

Смоделируем эволюцию зоных диаграмм МЛГ InGaAs/InAlAs при изменении толщины спейсера (рисунок 3.9). Концентрация электронов  $n_{\rm S}$  в КЯ монотонно уменьшается с увеличением толщины спейсера. Одновременно происходит монотонное увеличение параметра P, т.е. доли ДЭГ, проникающей в барьеры. Это связано с тем, что глубина V-образной потенциальной ямы увеличивается при удалении КЯ от области дельта-легирования. Чем дальше КЯ от примесей, тем менее охотно электроны с доноров переходят в КЯ. Так как электрическое поле примесей не зависит от расстояния до них (3.3), то разность потенциалов

между дельта-слоем и КЯ увеличивается пропорционально толщине спейсера. При толщине спейсера больше 6 нм дно V-образной ямы опускается ниже уровня Ферми и часть электронов локализуется в области дельта-слоя и не переходит в КЯ. Формируется параллельный проводящий слой. Доля электронной плотности, локализованной в барьере (коэффициент P), слабо зависит от толщины спейсера при  $L_{\rm sp}=1-5$  нм. Это объясняется тем, что дно V-образного потенциала при такой толщине спейсера находится выше по энергии, чем положение уровней подзон размерного квантования и волновая функция электронов туннельно почти не проникает в барьеры.

Энергии межзонной рекомбинации электронов и дырок в НЕМТ гетероструктурах увеличиваются при увеличении толщины спейсера (рисунок 3.10), но эта зависимость слабая. Этот результат согласуется с предыдущими расчетами при вариации концентрации легирования: так как при увеличении толщины спейсера уменьшается концентрация электронов в КЯ, то это приводит к росту энергий межзонных переходов.

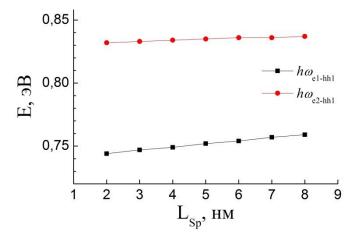


Рисунок 3.10 — Зависимость энергий межзонных переходов в КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  толщиной 20 нм от  $L_{sp}$ 

### 3.5 Влияние толщины барьера на зонную структуру $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$

Толщина барьера является одним из основных параметров НЕМТ гетероструктур, поскольку для обеспечения высоких параметров транзистора КЯ должна располагаться как можно ближе к поверхности. Однако электронная плотность ДЭГ  $n_{\rm S}$  уменьшается при уменьшении толщины барьерного слоя  $L_{\rm B}$ . Это является основной проблемой при эпитаксии мелких, расположенных близко к поверхности КЯ. Истощение плотности двумерного электронного газа происходит из-за поверхностных состояний, присутствующих на границе с атмосферой или металлом в любом полупроводнике. Часть электронов из гетероструктуры переходит на поверхностные состояния. Проведем модельные расчеты зависимости зонных

диаграмм HEMT-наногетероструктур InGaAs/InAlAs от толщины барьерного слоя  $L_{\rm B}$ . Состав и толщина остальных слоев совпадает с базовой гетероструктурой.

Электроны, заполняющие поверхностные состояния создают поверхностное электрическое поле. При приближении КЯ к поверхности путем уменьшения  $L_{\rm B}$  это отталкивающее электроны электрическое поле приводит к уменьшению концентрации электронов в канале. Эволюция зонных профилей гетероструктур InGaAs/InAlAs при изменении толщины барьера представлена на рисунке 3.11.

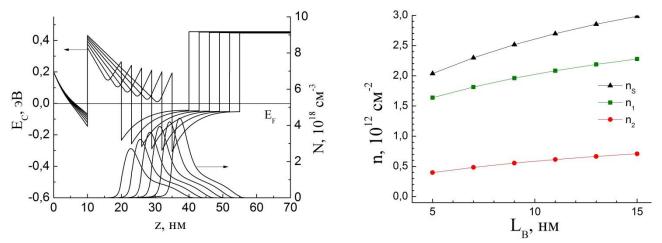


Рисунок 3.11 — Зависимость (a) пространственного профиля края зоны проводимости и ( $\delta$ ) электронной концентрации от толщины барьерного слоя  $In_{0.52}Al_{0.48}As$ 

Зависимость энергий межзонных переходов от толщины барьера  $In_{0.52}Al_{0.48}As$  приведена на рисунке 3.12. Наблюдается монотонное увеличение энергии межзонных переходов в КЯ при приближении КЯ к поверхности. Эта зависимость соответствует уменьшению плотности электронов в КЯ и, в соответствии с (3.3), снижению электрического поля, действующего на электроны в КЯ и приводящего к асимметрии потенциала.

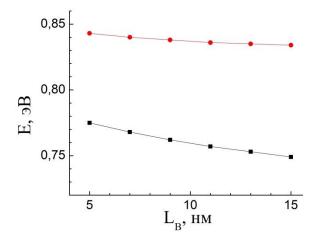


Рисунок 3.12 — Зависимость энергий межзонных переходов в КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  толщиной 20 нм от  $L_{sp}$ 

### 3.6 Влияние содержания In в барьере на зонные диаграммы In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As/In<sub>v</sub>Al<sub>1-v</sub>As

Обычно для получения МЛГ InGaAs/InAlAs на подложках InP в качестве барьера используется решеточно-согласованный к InP твердый раствор  $In_{0.52}Al_{0.48}As$ . Однако в ряде работ докладывалось об улучшении транспортных характеристик гетероструктур, в которых содержание индия в барьере  $In_yAl_{1-y}As$  уменьшалось. При уменьшении у увеличивается ширина запрещенной зоны  $In_yAl_{1-y}As$ , а также разрыв зоны проводимости на гетерогранице  $In_yAl_{1-y}As$ /  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ , что приводит к усилению локализации электронов в КЯ. Проведем моделирование зонной структуры МЛГ InGaAs/InAlAs при вариации состава верхнего барьерного слоя  $In_yAl_{1-y}As$  (y = 0.52 - 0.40). Конструкция гетероструктур совпадает с базовой.

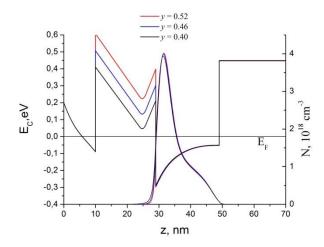


Рисунок 3.13 — Зависимость пространственного профиля края зоны проводимости и электронной концентрации от состава у барьерного слоя  $In_{\nu}Al_{1-\nu}As$ 

Вариация профиля зоны проводимости при изменении состава верхнего барьера представлена на рисунке 3.13. Согласно расчетам, концентрация электронов в КЯ при фиксированной плотности ионизированных доноров  $N_D$  не зависит от состава барьера. Однако, за счет повышения разрыва зоны проводимости уменьшается амплитуда хвостов электронных ВФ в барьере InAlAs (монотонно снижается параметр P). При увеличении высоты потенциального барьера дно V-образной потенциальной ямы поднимается выше по энергии по отношению к уровню Ферми  $E_F$ . Амплитуда хвостов электронной плотности в барьере  $In_yAl_1$  уAs уменьшается при уменьшении y. Это позволяет в гетероструктурах с обедненном индием барьером повысить концентрацию легирования и двумерную плотность электронов по сравнению с изоморфными гетероструктурами аналогичного состава.

Энергии межзонных переходов в КЯ практически не зависят от состава барьера.

#### Выводы

В результате проведенного компьютерного расчета была определена зависимость электронного спектра в МЛГ InGaAs/InAlAs от варьируемых параметров — концентрации легирования, толщины спейсера, состава и толщины КЯ InGaAs, состава и толщины барьера InAlAs. Основными параметрами, определяющими квантовые состояния электронов и дырок и, следовательно, энергии межзонных переходов в КЯ являются концентрация электронов  $n_S$ , толщина КЯ и содержание In x в КЯ In $_x$ Ga $_{1-x}$ As. Толщина  $L_{KR}$  КЯ влияет на энергию состояний электронов и дырок из-за их пространственного ограничения в потенциальной яме. Уменьшение  $L_{KR}$  приводит к увеличению энергии электронов и дырок за счет размерного эффекта. Зависимость энергий межзонных переходов от состава КЯ x соответствует изменению ширины запрещенной зоны InGaAs. Также в результате расчетов были определены тенденции зависимостей концентрации ДЭГ в подзонах размерного квантования  $n_i$ , зонных диаграмм и энергий оптических переходов от толщины спейсера, барьера и состава этих слоев, а также концентрации легирования. Ясно, что электронные свойства МЛГ сложным образом зависят от этих параметров. Возникает вопрос, можно ли систематизировать каким-либо образом все эти зависимости и упростить рассмотрение электронных свойств МЛГ InGaAs/InAlAs?

Квантовые состояния электронов и дырок в МЛГ определяются потенциалом гетероструктуры, зависящим от толщин слоев и разрывов зон на гетерограницах, а также электростатическим потенциалом, действующим на электроны со стороны примесей и поверхностных состояний. Рассмотрим это электростатическое поле, действующее на ДЭГ, со стороны примесей. Из условия полной электронейтральности и выражения (3.3) следует прямая пропорциональность между электрическим полем, действующим на ДЭГ со стороны ионов примесей и поверхностных состояний, и плотностью  $n_S$  электронов в КЯ. Это электрическое поле не зависит от характера распределения легирующих примесей (объемное или дельталегирование), толщины спейсера, глубины залегания КЯ от поверхности, поскольку, как было сказано, электрическое поле в двумерном случае не зависит от расстояния до двумерного заряда. Варьирование этих конструкционных параметров гетероструктуры, разумеется, приводит к изменению потенциального профиля в КЯ, ВФ и энергий электронных и дырочных подзон, но эти изменения являются функцией электронной плотности  $n_S$ . Было проведено дополнительное моделирование, которое подтвердило, что для широкого диапазона изменения параметров спейсера, барьера, профиля легирования в КЯ  $In_xGa_{1-x}As/In_vAl_{1-v}As$  одинаковой толщины и состава x, с одинаковой плотностью  $n_S$ , совпадают энергии состояний носителей заряда.

Это объясняется высокой величиной разрыва зоны проводимости на гетерогранице InGaAs/InAlAs (порядка 0.5 эВ). Поэтому различия потенциала, связанные с перечисленными вариациями конструкции, находятся в областях вне КЯ  $In_xGa_{1-x}As$ , где ВФ электронов и дырок экспоненциально затухают, что приводит к малым различиям ВФ и энергий носителей заряда. Отсюда следует условие, при котором нарушается этот принцип: при высокой плотности электронов  $n_S > 3.5 \cdot 10^{12}$  см<sup>-2</sup> в момент формирования параллельного проводящего слоя. В этом случае рядом с КЯ формируется глубокая туннельно-связанная потенциальная яма, приводящая к частичному проникновению ВФ ДЭГ в область барьеров. В этих условиях в области примесей у ВФ электронов появляется локальный максимум, а характер и энергия электронных состояний начинают зависеть от способа легирования, толщины спейсера и др.

Универсальный характер зависимости энергий оптических переходов от плотности электронов при фиксированных толщине и составе КЯ позволяет построить соответствующие номограммы (рисунок 3.14) и использовать их для анализа оптических свойств широкого класса МЛГ различающейся конструкции.

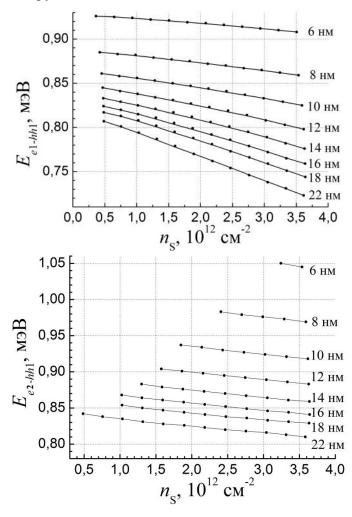


Рисунок 3.14 - Номограммы зависимостей энергий межзонных переходов e1-hh1 и e2-hh1 от слоевой концентрации ДЭГ  $n_S$  в КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  различной толщины

## Глава 4. Спектроскопия фотолюминесценции модулированно-легированных наногетероструктур InGaAs/InAlAs с напряженными вставками InAs и GaAs

МЛГ InGaAs/InAlAs являются перспективными материалами для ряда применений в СВЧ электронике. Это связано с высокими параметрами электронного транспорта твердого InGaAs, а также модулированно-легированных КЯ с активной областью InGaAs/InAlAs, по сравнению с другими полупроводниковыми материалами. В последние годы широко исследуется возможность модификации транспортных характеристик ДЭГ в гетероструктурах InAlAs/InGaAs путем введения различных функциональных слоев-вставок в составные КЯ. Так, введение в КЯ InAlAs/InGaAs/InAlAs нанометровых слоев InAs позволяет увеличить подвижность и максимальную дрейфовую скорость [33, 213]. Тонкие субслои InAs внутри КЯ  $In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As$  действует в роли дополнительной потенциальной ямы, которая, в зависимости от толщины и положения, может существенно модифицировать распределение электронной плотности в гетероструктуре и электронный спектр [185,214]. Вследствие пространственной локализации ДЭГ в области вставок InAs продольная эффективная масса электронов в СКЯ уменьшается по сравнению с изоморфными InGaAs/InAlAs КЯ [33, 215]. В литературе модификации электронных состояний СКЯ при введении нановставок InAs обсуждаются с точки зрения оптимизации электронного транспорта, а данные об исследовании спектра ДЭГ в НЕМТ-наногетероструктурах с составными квантовыми ямами, содержащими нановставки InAs, довольно скудны. Оптические свойства СКЯ InAlAs/InGaAs/InAlAs с субслоями GaAs не были исследованы вовсе.

В данной главе представлены результаты исследования электронных свойств НЕМТ наногетероструктур  $In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ , содержащих тонкие вставки InAs и GaAs в КЯ. В работе проводится подробный анализ изменения положения и формы линий ФЛ при модификации конструкции КЯ введением тонких полупроводниковых субслоев.

## 4.1 Наногетероструктуры InGaAs/InAlAs на подложках InP со вставками InAs различной толщины в квантовой яме

### 4.1.1 Структура и условия получения экспериментальных образцов

В качестве подложек InP использовались легированные Fe полуизолирующие односторонне полированные подложки с кристаллографической ориентацией  $(1\ 0\ 0) \pm 0.1^\circ$  фирмы Wafer Technology Ltd. Плотность дислокаций менее  $5\cdot 10^4$  см<sup>-2</sup>.

Образцы представляли собой НЕМТ гетероструктуры с односторонним  $\delta$ -Si легированием, включающие в себя составную КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$  с центральной вставкой InAs, ограниченную барьерными слоями  $In_{0.52}Al_{0.48}As$  [ 216 ]. Исследовалось влияние толщины вставки InAs в КЯ на энергетический спектр, оптические и электронные транспортные свойства. В таблице 4.1 представлена схема исследуемых образцов. При сохранении общей толщины КЯ, равной 16 нм, в центр КЯ были введены нановставки InAs толщиной  $L_{InAs} = 3.0$ , 2.1, 2.1 и 1.7 нм для образцов № 9T, 10T, 11T и 12T, соответственно.

Таблица 4.1 – Конструкция образцов 9T-12T с центральной нановставкой InAs в КЯ

Слой	Состав	Толщина, нм
Сар-слой	$i-In_{0.53}Ga_{0.47}As$	5.2
Барьер	$i-In_{0.52}Al_{0.48}As$	14.5
Легирование	$\delta$ -Si $(N_{\rm Si} = 5.6 \cdot 10^{12}  \rm cm^{-2})$	ı
Спейсер	$i-In_{0.52}Al_{0.48}As$	4.3
Составная	$In_{0.53}Ga_{0.47}As$	
квантовая	InAs	16
яма	$In_{0.53}Ga_{0.47}As$	
Буфер	$i-In_{0.52}Al_{0.48}As$	400
Подложка	InP	_

Предростовая подготовка подложек осуществлялась путем отжига в атмосфере  $As_4$  при постепенном повышении температуры подложки до 525 °C в течение 9 мин для обр. 9Т и 10Т, и 15 мин для обр. 11Т и 12Т. Температура роста КЯ образцов 9Т и 10Т составляла  $T_g = 470$  °C и была ниже, чем для образцов 11Т и 12Т ( $T_g = 500$  °C). Все остальные слои образцов № 9Т–12Т выращивались при температуре подложки  $T_g = 500$  °C. Параметры КЯ и технологические условия формирования КЯ, а именно: температуры роста  $T_g$  КЯ, отношения парциальных давлений молекулярных потоков элементов V и III групп таблицы Д.И. Менделеева  $\gamma_1 = P_{As}/(P_{In} + P_{Al})$  при выращивании слоёв InAlAs,  $\gamma_2 = P_{As}/(P_{In} + P_{Ga})$  при выращивании КЯ приведены в таблице 4.2.

Таблица 4.2 — Особенности конструкции КЯ гетероструктур  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  с одиночной вставкой InAs и МЛЭ режимы выращивания

№	$L_{ m KS}$ , ни	$L_{ m InAs}$ , HM	$\gamma_1$	$\gamma_2$	$T_g$ (КЯ), °С
9T	16	3.0	92	86	470
10T	16	2.1	92	86	470
11T	16	2.1	90	77	500
12T	16	1.7	90	77	500

В таблице 4.3 приведены значения слоевой концентрации  $n_S$  и подвижности  $\mu_e$  ДЭГ в составных КЯ. Известно, что введение вставок InAs в КЯ InGaAs может приводить к увеличению подвижности электронов, но зависит от ряда факторов: например, толщины

вставок, технологических режимов роста. Согласно полученным данным, для выбранной конструкции гетероструктур и условий роста наиболее оптимальной является толщина вставки InAs  $L_{\text{InAs}} = 21$  Å (образцы 10T и 11T). Увеличение или уменьшение  $L_{\text{InAs}}$  приводит к уменьшению  $\mu_e$  (образцы 9T и 12T). Концентрация электронов для всех выращенных образцов близка и не зависит от толщины вставки  $L_{\text{InAs}}$  и температуры роста КЯ.

Таблица 4.3 — Электрофизические параметры гетероструктур  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  с одиночной вставкой InAs при температурах 300 и 77 К

3.0	$\mu_e$ , cm <sup>2</sup>	<sup>2</sup> /(B·c)	$n_{S}, 10^{12} \text{ cm}^{-2}$	
№	300 K	77 K	300 K	77 K
9T	4970	6770	3.55	3.51
10T	7800	14080	3.81	3.80
11T	8430	17400	3.72	3.70
12T	7770	14400	3.71	3.69

### 4.1.2 Электронная микроскопия

На рисунке 4.1 представлено темнопольное высокоугловое изображение просвечивающей растровой электронной микроскопии (ПРЭМ) образца № 10Т. На изображении разрешаются все слои гетероструктуры: подложка InP, буферный слой InAlAs, гетерограница InAlAs/InP, КЯ InGaAs со вставкой InAs, барьерный слой InAlAs, защитный слой InGaAs.

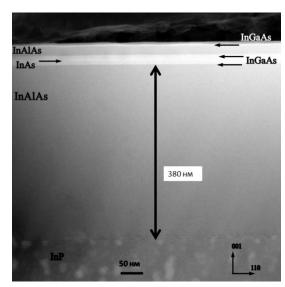


Рисунок 4.1 – Темнопольное ПРЭМ-изображение образца № 10Т

Высокоразрешающие ПРЭМ-изображения областей КЯ для образцов 9Т-12Т представлены на рисунке 4.2. Для каждого ПРЭМ-изображения построен профиль интенсивности сигнала по направлению роста, усреднённый по выделенной области изображения; профиль строился от поверхности образцов к подложке. Поскольку в режиме

высокоуглового рассеяния интенсивность сигнала пропорциональна  $Z^R$  ( $R \approx 1.7$ –2.0, Z – атомный номер элемента), то профиль интенсивности сигнала определяется распределением элементов III группы – Al (Z=13), Ga (Z=31) и In (Z=49). Контраст изображения на гетерограницах  $In_xGa_{1-x}As/In_xAl_{1-x}As$  ( $x\approx 0.5$ ) определяется заменой более легких атомов Al на атомы Ga. Самая высокая интенсивность сигнала наблюдается от слоев InAs. Наклон профилей интенсиности сигнала и различие яркости слоев InAlAs, расположенных сверху и снизу от КЯ, обуславливается неоднородностью толщины образцов для ПЭМ.

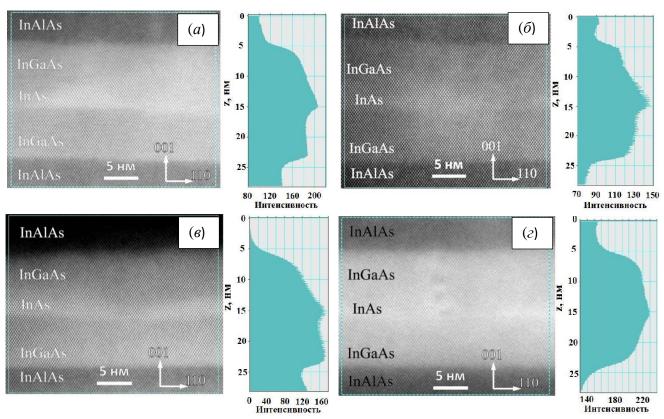


Рисунок  $4.2 - \Pi P Э M$  изображения и интегральные профили интенсивности сигнала от области КЯ: a – образец 9T,  $\delta$  – образец 10T,  $\varepsilon$  – образец 11T,  $\varepsilon$  – образец 12T

В таблице 4.4 приведены определённые с помощью ПРЭМ значения толщины КЯ, которые находятся в хорошем согласии с технологически заданными значениями. Для вставок ПРЭМ-измерения дают завышенные значения толщины по сравнению с технологически заданными. По-видимому, это обусловлено поверхностной сегрегацией атомов индия во время эпитаксиального роста, приводящего к уширению толщин вставок InAs. Эффект сегрегации индия приводит к выталкиванию атомов In из растущего слоя InAs и искажению профиля состава [217]. Такое предположение подтверждается сравнением данных для образцов 10T и 11T: при одинаковом технологически заданном значении толщины вставки InAs  $L_{\text{InAs}} = 2.1$  нм экспериментально измеренное значение толщины для образца 11T больше. КЯ образца 11T выращена при более высокой температуре  $T_{\text{g}}$ , что могло способствовать усилению явления сегрегации.

Таблица 4.4 – Технологически заданные и экспериментально определённые по изображениям ПЭМ толщины слоёв и гетерограниц исследуемых образцов

Mo	$L_{\mathrm{Q}}$	W, HM	$L_{ m In}$	As, Å	A Å	A Å	δ <sub>1</sub> , Å	s å	$T \circ C$
№	Техн.	Эксп.	Техн.	Эксп.	$\Delta_1$ , A	$\Delta_2$ , Å	$0_1, A$	$\delta_2$ , Å	$T_{\rm g}$ , °C
9T	16	17±1	3.0	4.0±0.5	0.6	1.0	1.0±0.5	1.5±0.5	470
10T	16	17±1	2.1	3.0±0.5	1.0	1.5	1.0±0.5	1.3±0.5	470
11T	16	17.5±1	2.1	4.0±0.5	1.0	1.7	1.0±0.5	1.3±0.5	500
12T	16	17.5±1	1.7	2.8±0.5	1.0	2.0	1.0±0.5	1.5±0.5	500

 $(\Delta_1$  и  $\Delta_2$  — толщины нижней и верхней гетерограниц InAlAs/InGaAs,  $\delta_1$  и  $\delta_2$  — толщины нижней и верхней гетерограниц InGaAs/InAs,  $T_g$  — температура роста КЯ)

В таблице 4.4 также приведены данные по толщинам границ раздела InGaAs/InAlAs и InAs/InGaAs в составной квантовой яме. Известно, что размытие гетерограниц происходит физических процессов, происходящих вследствие во время эпитаксиально гетероструктуры: диффузии атомов, сегрегации атомов In. Размытость нижних (более близких к подложке) гетерограниц InAlAs/InGaAs меньше, чем верхних ( $\Delta_1 < \Delta_2$ ). В то же время наблюдается тенденция возрастания  $\Delta_2$  при увеличении температуры роста КЯ  $T_{
m g}$ . При повышении  $T_{\rm g}$  усиливается диффузия атомов Ga и Al, и это приводит к увеличению размытости границ раздела эпитаксиальных слоёв InAlAs и InGaAs. Следует подчеркнуть, что в этом случае речь идёт об образовании переходного слоя из твердого раствора AlGaInAs на гетерограницах без образования дислокаций, дефектов упаковки и других протяженных дефектов, как это видно из высокоразрешающих ПРЭМ-изображений.

Размытие границ раздела вставок InAs и слоев InGaAs составной КЯ обусловлено взаимной диффузией атомов In и Ga. Нижняя гетерограница InGaAs/InAs более резкая, чем верхняя гетерограница InAs/InGaAs ( $\delta_1 < \delta_2$ ). Скорее всего, это связано с сегрегацией атомов индия из областей с повышенным содержанием In (вставок InAs) к поверхности во время эпитаксиального роста. Стоит отметить, что согласно снимкам ПЭМ в образцах 9Т-12Т не произошло образование нанокластеров InAs, хотя в работах [218, 219] сообщалось о получении кластеров InAs в слоях InGaAs (называемых квантовыми точками из-за своих электронных свойств) методом МЛЭ при близких технологических условиях ( $T_g = 500\,^{\circ}$ C).

Сопоставление величин размытия гетерограниц КЯ  $\Delta_1$  и  $\Delta_2$ , а также вставок InAs  $\delta_1$  и  $\delta_2$  (таблица 4.4) и значений подвижности электронов (таблица 4.3) даёт основание предположить, что качество гетерограниц КЯ не является доминирующим фактором, влияющим на подвижность электронов.

На рисунке 4.3 представлены темнопольные ПРЭМ-изображения области гетерограницы подложка InP/буфер InAlAs для всех исследуемых образцов и профили интенсивности сигнала, усреднённые по выделенным областям изображения.

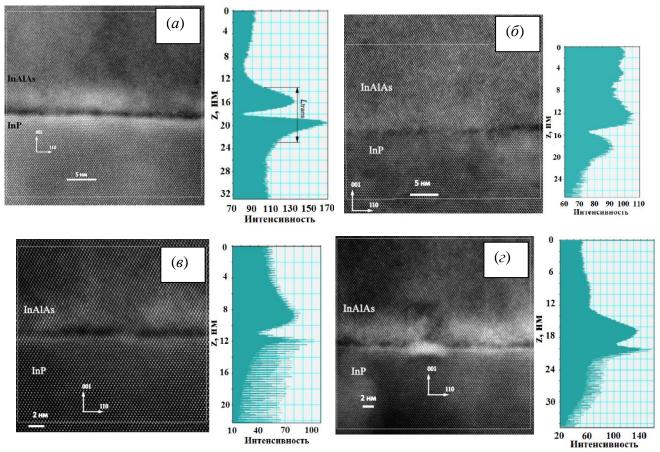


Рисунок 4.3 – ПРЭМ изображения и интегральные профили интенсивности сигнала от области гетерограницы InP/InAlAs: a – образец 9T,  $\delta$  – образец 10T,  $\varepsilon$  – образец 11T,  $\varepsilon$  – образец 12T

Из рисунка 4.3 следует, что кристаллическая структура, представленная правильными рядами дифракционных изображений атомов, не нарушается при переходе от подложки к буферному слою и сохраняется во всей переходной области интерфейса InP/InAlAs. Изображения границ раздела подложка InP/буфер InAlAs демонстрирует высокую размытость гетерограницы во всех образцах. Общей закономерностью для всех образцов является образование интерфесного промежуточного слоя InAlAsP толщиной  $L_{\rm trans} \sim 10$  нм со сложным распределением элементов In, Al, As и P. Согласно интегральным профилям интенсивности ПЭМ (рисунок 4.3) в переходном граничном слое можно выделить три характерные области с различным составом, которые выглядят как чередующиеся светлая полоса — тёмная полоса — светлая полоса. Учитывая особенность контраста высокоуглового ПРЭМ-изображения, более тёмные области на изображении соответствуют полупроводниковым твердым растворам, обогащенным легкими элементами — Al и P, а яркие области на изображении — твердым растворам, обогащённым тяжелыми элементами In и As.

Толщина первой светлой области (со стороны подложки InP) порядка 3 нм. Ее происхождение связано, скорее всего, с предростовым отжигом подложки в потоке мышьяка. Во время отжига в приповерхностном слое подложки InP фосфор (Z=15), уходящий с

естественным окислом, замещается мышьяком (Z=33) и образуются несколько атомных слоев InAs. Степень замещения фосфора мышьяком постепенно уменьшается при удалении от поверхности подложки и формируется твердый раствор InAsP, поэтому яркость первой светлой полосы монотонно ослабевает вглубь подложки. Также за счёт сегрегации индия и механических напряжений в образующихся слоях InAs при высокой температуре подложки ( $525^{\circ}$ C) возможно образование не плоских слоев, а обогащённых InAs кластеров (рисунок  $4.3 \ \epsilon$ ).

Происхождение тёмной полосы и следующей за ней светлой полосы на гетерогранице связано, скорее всего, с началом эпитаксиального роста. МЛЭ рост буферного слоя InAlAs начинается с одновременного открытия заслонок молекулярных источников In и Al. Сразу после этого наблюдается эффект «бани», заключающийся в нестационарности потоков атомов In и Al на ростовую поверхность. Как правило, потоки In и Al являются избыточными в первые секунды роста. Скорость установления теплового баланса в источниках элементов In и Al различаются, поэтому в начале роста формируется тройной твердый раствор InAlAs переменного состава. Выше располагается область буферного слоя InAlAs с однородным контрастом, свидетельствующая об установлении равновесия процессов перераспределения атомов In и Al.

# 4.1.3 Спектроскопия фотолюминесценции наногетероструктур InGaAs/InAlAs со вставками InAs различной толщины

Энергия фотонов и интенсивность возбуждающего лазерного излучения позволили регистрировать спектры  $\Phi$ Л от всех слоев InGaAs/InAlAs *HEMT*-наногетероструктур. Было обнаружено, что в диапазоне 0.6-1.9 эВ в спектрах  $\Phi$ Л всех образцов можно выделить четыре характерных диапазона энергий, в которых отчетливо проявляются линии  $\Phi$ Л, соответствующие рекомбинации носителей заряда в определенных областях *HEMT*-структур:

- 1) квантовая яма InAlAs/InGaAs/InAlAs диапазон  $0.6 < \hbar\omega < 0.8$  эВ;
- 2) гетерограница между подложкой InP и буферным слоем InAlAs  $-1.24 < \hbar\omega < 1.38$  эВ;
- 3) подложка  $InP 1.38 < \hbar\omega < 1.48$  эВ;
- 4) барьерный слой InAlAs  $-1.48 < \hbar\omega < 1.60$  эВ.

На рисунке 4.4 представлены нормированные спектры ФЛ при T=87 К в области энергий фотонов  $0.6 < \hbar\omega < 0.8$  эВ образцов 9Т - 12Т, а в таблице 4.5 — энергетическое положение максимумов  $E_{\rm max}$ , ширина на половине амплитуды  $\Delta_{\rm max}$  и относительная интенсивность  $I_{\rm max}$  наблюдаемых пиков. Наблюдаемые пики люминесценции соответствуют рекомбинации ДЭГ и фотогенерированных дырок, захваченных в КЯ. Они обладают большой полушириной  $\Delta_{\rm max} \sim 70$ —80 мэВ, что объясняется заполнением двумерных состояний КЯ вырожденным ДЭГ. В сторону меньших энергий от пиков ФЛ наблюдается плечо. Подобная

несимметричность формы спектров ФЛ ДЭГ обычно связана с заполнением электронами в КЯ нескольких подзон размерного квантования, на что указывают как измеренные высокие значения концентрации ДЭГ  $n_S$ , так и результаты моделирования. Выход спектров ФЛ за границу чувствительности фотоприемника и относительно высокая температура регистрации 87 К не позволили точно выделить особенности ФЛ, связанные с несколькими подзонами СКЯ.

Энергетическое положение максимума пиков ФЛ от КЯ для всех образцов различаются: при увеличении толщины вставки InAs наблюдается сдвиг пиков в сторону меньших энергий. Для образцов 10Т и 11Т с одинаковой толщиной вставки (2.1 нм) максимумы спектров ФЛ расположены при близких энергиях.

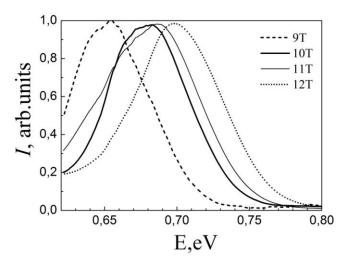


Рисунок 4.4 - Нормированные спектры ФЛ от СКЯ InAlAs/InGaAs с нановставками InAs различной толщины

Образцы 9Т-12Т существенно различаются интенсивностью ФЛ КЯ. Так как образцы различались конструкцией КЯ и используемыми условиями МЛЭ роста КЯ, то различия интенсивности ФЛ могут быть связаны как с зависимостью зонной структуры КЯ (ВФ электронов и дырок и их перекрытия) от толщины вставки InAs, так и с зависимостью структурного совершенства слоев КЯ от температуры роста. Так, в образцах 9Т и 10Т, КЯ которых выращена при одинаковых условиях ( $T_G = 470$  °C), увеличение толщины вставки с 2.1 до 3 нм привело к семикратному уменьшению интенсивности ФЛ. А сравнение спектров образцов 10Т и 11Т с одинаковой конструкцией КЯ показывает, что интенсивность ФЛ зависит от температуры роста КЯ и больше при  $T_{\rm G} = 500$  °C. Так как на ПРЭМ снимках не были обнаружены дислокации, дефекты упаковки и другие протяженные дефекты, то под структурным совершенством в данном случае понимается концентрация образующихся при МЛЭ точечных дефектов (в основном, вакансий), которые являются безызлучательной рекомбинации. Интенсивность ФЛ от КЯ образцов коррелирует с подвижностью ДЭГ (самая высокая и самая низкая интенсивность ФЛ наблюдаются,

соответственно, в образцах с наибольшей и наименьшей подвижностью ДЭГ), поэтому можно предположить, что центры безызлучательной рекомбинации одновременно приводят к рассеянию ДЭГ, снижая его подвижность.

Таблица 4.5 - Положение максимума  $E_{\rm max}$ , полуширина  $\Delta_{\rm max}$  и интенсивность  $I_{\rm max}$  пиков ФЛ от СКЯ InAlAs/InGaAs с нановставками InAs различной толщины

№	$E_{\rm max}$ , эВ	$\Delta_{ m max}$ , мэ $ m B$	$I_{ m max}$ , отн. ед.
9T	0.65	67	0.066
10T	0.68	66	0.493
11T	0.69	83	1
12T	0.70	72	0.941

На рисунке 4.5 представлены фрагменты спектров ФЛ исследуемых образцов в диапазоне энергий фотонов 1.2–1.7 эВ ( $T=87~{\rm K}$ ). На спектрах ФЛ присутствуют несколько пиков, связанных с рекомбинацией носителей заряда в барьерных слоях InAlAs *HEMT*-наногетероструктур, подложке InP и на гетерогранице InAlAs/InP, что указано на рисунке 4.5.

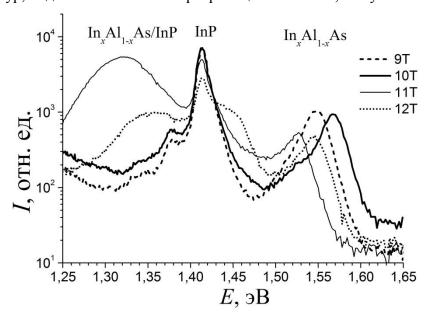


Рисунок 4.5 - Спектры ФЛ от буферных слоев InAlAs, подложки InP и границы InAlAs/InP в диапазоне 1.25 – 1.65 эВ.

Особенности в спектрах  $\Phi Л$  в области энергий фотонов  $1.38 < \hbar \omega < 1.48$  эВ относятся к оптических переходам в подложке InP. Узкий пик на спектрах  $\Phi Л$  при  $\hbar \omega = 1.41$  эВ соответствует экситонной рекомбинации, а высокоэнергетическое плечо, выраженное сильнее всего для образца 12T, — межзонной излучательной рекомбинации свободных электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне в подложке InP. Пик при  $\hbar \omega = 1.38$  эВ, наблюдаемый в спектрах  $\Phi Л$  обр. 9T и 10T, соответствует переходам электронов из зоны проводимости InP на

акцепторный уровень [220, 221]. Уровень связан с намеренным легированием подложек InP для придания им полуизолирующих свойств (легирующей примесью является Fe). Для обр. 11Т и 12Т примесный пик ФЛ от подложки перекрыт уширенными спектрами от гетероперехода InAlAs/InP.

Наблюдаемые в диапазоне энергий фотонов  $1.48 < \hbar\omega < 1.62$  эВ пики ФЛ относятся к рекомбинации электронов и дырок в нелегированном барьерном слое из тройного твердого раствора  $In_xAl_{1-x}As$ . В таблице 3 представлены энергетические положения максимумов пиков  $E_{InAlAs}$  и значения полуширины пиков  $\Delta_{InAlAs}$ . Из-за относительно высокой температуры регистрации (87 K) на спектрах ФЛ от слоев  $In_xAl_{1-x}As$  невозможно различить переходы с участием экситонов и межзонную рекомбинацию свободных носителей, а высокая полуширина пиков  $\Delta_{InAlAs}$  объясняется флуктуациями состава  $In_xAl_{1-x}As$ . Поэтому для определения содержание индия x в буферном слое использовалась простая зависимости ширины запрещенной зоны твердого раствора  $In_xAl_{1-x}As$  от x (T=87 K) без введения поправок на энергию связи экситона (1.18) и положение максимума ФЛ относительно  $E_g$  (1.17):

$$E_g (In_xAl_{1-x}As) = 3.089 - 3.402x + 0.72x^2, \text{ }9B$$
 (4.1)

Наблюдаемый разброс в положении пиков связан с воспроизводимостью технологических условий роста и точностью соблюдения заданного состава  $In_xAl_{1-x}As$ . При изменении содержания In на 0.01 в твердом растворе  $In_xAl_{1-x}As$  ( $x\sim0.53$ ) ширина запрещенной зоны изменяется на 23 мэВ. Представленные в таблице 4.6 результаты показывают, что в образцах 9Т-12Т решеточно-согласованный к InP состав  $In_xAl_{1-x}As$  выдерживался с точностью  $\Delta x=0.02$ . Отличие значений мольной доли x в буферном слое  $In_xAl_{1-x}As$  мы связываем с возможным изменением парциальных давлений In и/или Al в течение процесса эпитаксиального роста.

№	$E_{\mathrm{InAlAs}},\Im\mathrm{B}$	$\Delta_{InAlAs}$ , мэ $B$	x
9T	1.548	31	0.51
10T	1.567	27	0.50
11T	1.527	39	0.52
12T	1.544	36	0.51

Таблица  $4.6 - \Pi$ араметры спектров  $\Phi \Pi$  от барьерного слоя  $In_x Al_{1-x} As$ 

Пики ФЛ в области энергий фотонов  $1.24 < \hbar\omega < 1.38$  эВ связаны с оптическими переходами на гетерогранице  $In_{0.52}Al_{0.48}As/InP$ . По типу зонной структуры в идеальном случае резкой границы раздела  $In_{0.52}Al_{0.48}As/InP$  гетеропереход относится ко 2-го роду. При фотовозбуждении носителей заряда электроны локализуются на одной стороне гетерограницы (в подложке InP), а дырки — на другой стороне (в  $In_{0.52}Al_{0.48}As$ ). В результате в области

гетероперехода возникает локальное электрическое поле, связывающее неравновесные носители заряда. Туннелирование носителей через границу навстречу друг другу с последующей излучательной рекомбинацией приводит к возникновению пика на спектрах ФЛ. Из-за пространственно-непрямой зонной структуры и слабого перекрытия ВФ электронов и дырок интенсивность ФЛ от гетеропереходов II рода относительно низкая.

Для образцов 9Т и 10Т пики ФЛ от гетерограницы, расположенные при 1.34 эВ, значительно слабее перехода от подложки InP и буферного слоя InAlAs. В образцах 11Т и 12Т одновременно со смещением положения пиков в сторону меньших энергий наблюдается существенное возрастание интенсивности и ширины перехода от границы InAlAs/InP. Для пространственно непрямых переходов 2-го рода такая интенсивность ФЛ маловероятна.

Согласно литературным данным, пики ФЛ от гетерограницы  $In_{0.52}Al_{0.48}As/InP$  могут находиться в широком диапазоне энергий фотонов от 1.1 до 1.35 эВ, хотя в большинстве работ эти пики расположены при 1.2-1.35 эВ [222-225]. Большой разброс значений энергии данного перехода объясняется различным типом анионов (As и P) в InAlAs и InP и, следовательно, сильной зависимостью структуры гетерограницы InAlAs/InP от технологических условий ее формирования в процессе МЛЭ. Такие явления, как сегрегация атомов In и взаимообмен атомов  $As \leftrightarrow P$  в зависимости от условий роста приводят к формированию нерезкой гетерограницы, содержащей переходные слои между  $In_{0.52}Al_{0.48}As$  и InP, что отражается на ее фотолюминесцентных свойствах. Технологическими факторами, влияющими на формирование интерфейса, являются температура и время отжига подложки, давление мышьяка, температура роста, длительность прерывания роста.

В соответствии с цитированными данными можно предположить, что смещение и изменение формы пика  $\Phi$ Л от интерфейса InAlAs/InP связано с различием времени отжига подложек при предростовой подготовке. Время отжига в атмосфере  $As_4$  для обр. 9T и 10T составляло 9 мин, а для обр. 11T и 12T – 15 мин. Так как отжиг происходил в потоке  $As_4$ , то на поверхности подложки InP могло произойти замещение  $As \rightarrow P$  и образование тонкого слоя InAsP. Исследования ПРЭМ подтвердили формирование переходного слоя со сложным элементным профилем на гетерогранице InAlAs/InP. При увеличении длительности отжига растет толщина слоя InAsP и доля As в этом слое. Ширина запрещенной зоны InAsP ниже, чем в InAlAs и InP, поэтому переходный слой формирует квантовую яму для электронов и дырок. ВФ электронов и дырок смещаются друг к другу, приводя к увеличению вероятности такого перехода и интенсивности линии  $\Phi$ Л. Одновременно происходит красное смещение линии  $\Phi$ Л. Можно сказать, что из-за тонкого переходного слоя на гетерогранице зонная структура относится к смешанному гетеропереходу I-II рода [223,225]. На рисунке 4.6 представлена рассчитанная зонная диаграмма интерфейса In<sub>0.52</sub> $Al_{0.48}As$ /InP с тонким промежуточным слоем

 $InP_{0.7}As_{0.3}$  и без него. Как видно из этого рисунка, в случае образования КЯ  $InP_{0.7}As_{0.3}$  становятся возможны пространственно прямые переходы электронов из зоны проводимости в валентную зону в области интерфейса. В спектрах  $\Phi$ Л это приведёт к увеличению интенсивности соответствующего пика и к его сдвигу в сторону меньших энергий.

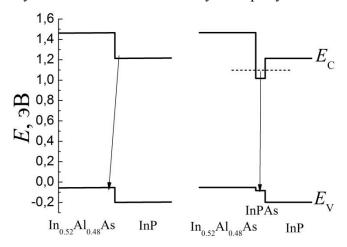


Рисунок 4.6 - Зонная диаграмма гетерограницы  $In_{0.52}Al_{0.48}As/InP$  без промежуточного слоя  $InP_{0.7}As_{0.3}$  и с промежуточным слоем  $InP_{0.7}As_{0.3}$ 

Как показали исследования ПРЭМ, переходный слой является достаточно размытым, без резких гетерограниц, по двум причинам — во-первых, из-за высокой температуры отжига и диффузионных процессов, во-вторых, из-за значительной механической деформации слоя, которая может приводить к негладкой поверхности слоя. При увеличении длительности отжига толщина и амплитуда флуктуаций толщины КЯ InAs возрастает. Поскольку экситоны локализуются в наиболее широких областях КЯ, то флуктуации толщины тонкого слоя InAs обусловливают уширение оптического перехода от данной пространственной области.

## 4.1.4 Моделирование зонной структуры квантовых ям InGaAs/InAlAs со вставками InAs различной толщины

С целью анализа спектров  $\Phi$ Л от КЯ образцов 9Т-12Т и исследования влияния толщины центральной вставки InAs на энергии и В $\Phi$  электронов и дырок в МЛГ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  был выполнен расчет зонной структуры исследованных КЯ. Метод расчета и используемые параметры полупроводников описаны в главе 2.

На рисунке 4.7 представлено сравнение пространственных профилей энергетических зон  $E_c$  и  $E_v$ , а также состояний электронов и дырок для гетероструктур, при изменении конструкции КЯ: однородной КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  и составных КЯ, содержащих нановставку InAs толщиной 1.7, 2.1 и 3 нм. Толщины и состав слоев соответствуют таблице 4.1.

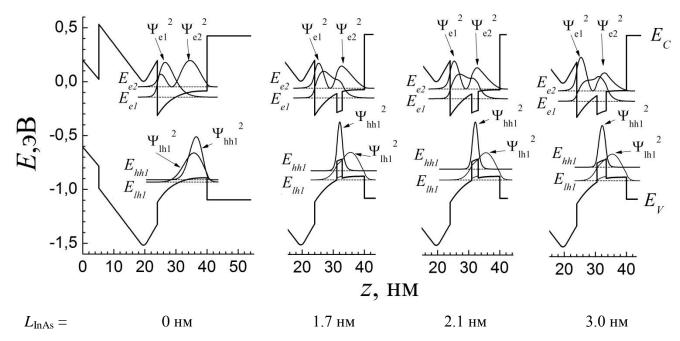


Рисунок 4.7 - Пространственные профили зон проводимости  $E_c$  и валентной  $E_v$ , квадратов волновых функций электронов и дырок  $\Psi_i$ , уровни размерного квантования  $E_i$  в гетероструктурах  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  без InAs вставки (слева) и с центральной InAs вставкой различной толщины (слева — направо): 1.7, 2.1 и 3.0 нм.

Согласно компьютероному расчету, электронные состояния в случае однородной КЯ формируются треугольной потенциальной ямой на верхней гетерогранице КЯ, создаваемой положительно заряженными донорами в  $\delta$ -легированном слое. ВФ электронов в первой подзоне размерного квантования  $\Psi_{e1}$  локализована в верхней половине КЯ. При введении вставки InAs в центре КЯ формируется дополнительная потенциальная яма для электронов. Происходит изменение формы ВФ электронов: в области вставки InAs у ВФ электронов в подзонах  $\Psi_{e1}$  и  $\Psi_{e2}$  образуется локальный максимум. На рисунке 4.8 представлена зависимость электронной плотности в КЯ от толщины вставки. Видно, что электроны под действием потенциальной ямы в слое InAs отодвигаются от верхней гетерограницы КЯ: с увеличением  $L_{\text{InAs}}$  уменьшается амплитуда электронной плотности N(z) у верхней гетерограницы КЯ и увеличивается амплитуда в центре КЯ, распределение электронной плотности приобретает бимодальный характер.

В КЯ заполненными являются две электронные подзоны размерного квантования. Слоевая концентрация электронов в составной КЯ при одинаковой дозе легирования практически не зависит от толщины вставки в диапазоне  $L_{\text{InAs}}$  от 0 до 4 нм и составляет  $\sim 3.6 \cdot 10^{12}$  см<sup>-2</sup>. При увеличении  $L_{\text{InAs}}$  происходит понижение энергии электронных уровней относительно уровня Ферми. Но так как одновременно с этим за счет локализации электронов в слое InAs уменьшается продольная эффективная масса и, следовательно, двумерная плотность

состояний в КЯ, то при увеличении толщины вставки InAs концентрация электронов в СКЯ практически не меняется.

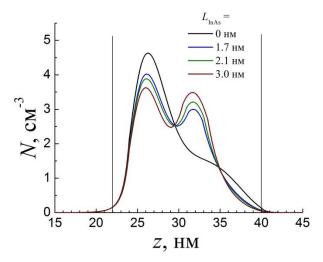


Рисунок 4.8 — Зависимость распределения электронной плотности в КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  от толщины центральной InAs вставки

При вариации толщины вставки InAs происходит изменение пространственного профиля потенциальной энергии для электронов и дырок и, следовательно, сдвиг уровней энергии. Зависимость энергетического спектра электронов от  $L_{\text{InAs}}$  отсительно слабая (по сравнению с зависимостью для дырок) — уровень  $E_{e1}$  смещается на 10 мэВ (относительно  $E_{\text{F}}$ ) при увеличении толщины слоя InAs с 1.7 до 3 нм. Это можно объяснить следующим образом. Из рисунка 4.7 видно, что состояния электронов в образцах со вставками формируются треугольной потенциальной ямой вблизи верхней границы InAlAs/InGaAs и потенциальной ямой слоя InAs, энергетическая глубина которых сравнима. В таком потенциале ВФ электронов  $\Psi_i$  распространяются практически на всю толщину квантовой ямы. При вариации толщины  $L_{\text{InAs}}$  потенциальный профиль изменяется в малой области пространства по сравнению с областью локализации ВФ, что приводит к слабой зависимости энергий электронных подзон от толщины вставки. При дальнейшем увеличении  $L_{\text{InAs}}$  больше 4.0 нм электронов нижней подзоны размерного квантования  $E_{e1}$  понижается ниже дна зоны проводимости  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$  и выделяется в самостоятельный уровень, связанный преимущественно со вставкой.

Введение центральной вставки InAs кардинально меняет ВФ и энергии тяжелых дырок. Дырки, в отличие от электронов, в гетероструктурах InGaAs/InAlAs локализуются у нижней границы КЯ, где электрическое поле ионизированных доноров экранировано ДЭГ и энергетические зоны плоские. При введении слоя InAs в центре КЯ формируется потенциальная яма для тяжелых дырок, приводящая к их локализации. Из-за большой эффективной массы даже при  $L_{\text{InAs}} = 1$  нм тяжелые дырки практически полностью

локализованы внутри вставки InAs, а положение края дырочной подзоны находится по энергии выше края валентной зоны  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ . Соответственно, при изменении толщины  $L_{InAs}$  наблюдается изменение энергии подзоны тяжелых дырок  $E_{hh1}$ . Эта зависимость приблизительно соответствует изменению энергии размерного квантования частицы массой  $m_{hh}$  в прямоугольной потенциальной яме глубиной  $\Delta E_V$  (InAs-In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As). При увеличении толщины слоя InAs с 1.7 до 3 нм уровень  $E_{hh1}$  смещается на 54 мэВ.

Для легких дырок вставка InAs создает более мелкую потенциальную яму, чем для тяжелых дырок, поэтому слои InAs толщиной 1-3 нм правктически не оказывают влияния на квантовые состояния этого типа носителей заряда.

Наблюдаемый экспериментально сдвиг спектров ФЛ в зависимости от толщины вставки InAs находится в хорошем соответствии с рассчитанными изменениями энергий размерного квантования носителей заряда в составной КЯ. На рисунке 4.9 приведена теоретическая зависимость энергий оптических переходов  $E_{e1}-E_{hh1}$  и  $E_{e2}-E_{hh1}$  и перекрытия ВФ электронов и дырок  $M_{ei-hh1}$  от  $L_{InAs}$  и также отмечено энергетическое положение максимумов пиков ФЛ  $E_{max}$  и рассчитанных энергий переходов  $E_{e1}-E_{hh1}$  и  $E_{e2}-E_{hh1}$  от толщины вставки. Для лучшего количественного согласия моделирования с экспериментальными результатами можно учесть измерения ПРЭМ реальных толщин вставок InAs в образцах 9Т-12Т, которые больше технологически заданных приблизительно на 1 нм. При введении такой поправки в  $L_{InAs}$  положения максимумов спетров  $E_{max}$  для всех образцов совпадут с рассчитанной энергией оптического перехода  $E_{e2}-E_{hh1}$ , а положение перехода  $E_{e1}-E_{hh1}$  будет меньше 0.65 эВ, т.е. за границей чувствительности используемого фотодетектора.

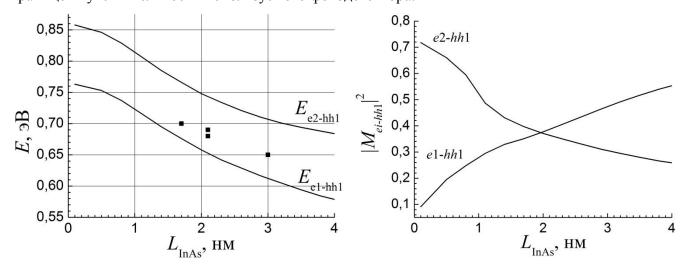


Рисунок 4.9 - Теоретическая зависимость от толщины вставки InAs: а) энергий оптических переходов  $E_{e1} - E_{hh1}$  и  $E_{e2} - E_{hh1}$  и б) квадратов интеграла перекрытия  $M_{ei\text{-}hh1}$  электронов и тяжелых дырок в КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ . Точки — эксперимент

На рисунке 4.9  $\delta$  представлена зависимость квадрата интеграла перекрытия  $M_{ei\text{-}hhl}$  ВФ электронов и тяжелых дырок от  $L_{\text{InAs}}$ . Видно, что с ростом толщины слоя InAs перекрытие состояний e1-hh1 монотонно увеличивается, а состояний e2-hh1 – уменьшается.

Похожие зависимости спектров ФЛ от гетероструктур, содержащих слои InAs в матрице из In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As на подложках InP, при изменении толщины InAs уже наблюдались ранее. Так, в работе [226] было показано, что длина волны излучения при ФЛ тонких КЯ InAs/In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As увеличивается от 1.6 мкм (0.77 эВ) до 2.2 мкм (0.56 эВ) при увеличении толщины слоя InAs от 2 до 23 монослоев. В работе [218] наблюдался сдвиг максимумов спектров ФЛ от островков (квантовых точек) InAs в матрице In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As в зависимости от количества монослоев нанесенного InAs (1 монослой InAs приблизительно равен 0.3 нм). Обе зависимости приведены на рисунке 4.10. При одном и том же количестве нанесенных монослоев InAs характерные размеры островков InAs при 3D росте больше, чем толщина слоя InAs при двумерном росте. Поэтому в случае формирования островков InAs энергия размерного квантования электронов и дырок меньше, и спектры ФЛ расположены при меньших энергиях, чем при двумерном распределении InAs.

Конструкция образцов в цитированных работах существенно отличалась от образцов 9Т-12Т. Во-первых, слои  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$  выступали в роли барьеров для слоев InAs, а слои InAlAsотсутствовали. В этом случае квантовые состояния фотовозбужденных электронов и дырок определяются величинами разрывов энергетических зон на гетерограницах InAs/InGaAs. Из-за малой эффективной массы электронов и относительно небольшой разрыва зоны проводимости  $InAs/In_{0.53}Ga_{0.47}As$  в тонком слое InAs формируется только один электронный уровень  $E_{e1}$  с  $B\Phi$ , локализованной в InAs и затухающими хвостами в слоях In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As. В нашем случае состояния электронов определяются потенциальным профилем составной КЯ, состоящей из слоев InAs,  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$  и окружающих их барьеров  $In_{0.52}Al_{0.48}As$ ,  $B\Phi$  электронов распространяются на всю толщину составной КЯ, в которой могут находиться несколько уровней энергии. Во-вторых, слои InAs в цитированных работах были нелегированными, поэтому наблюдавшиеся пики ФЛ соответствовали экситонным переходам в слоях InAs, характеризующимся относительно невысокой шириной при температуре 77 К (~10 - 20 мэВ). Легирование гетероструктур в нашем случае не только определяет профиль потенциальной энергии для носителей заряда и их пространственное распределение, но и приводит к заполнению двумерных энергетических подзон. Высокая плотность ДЭГ приводит к диссоциации экситонов и является причиной уширения линий ФЛ от КЯ InAs/In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As/  $In_{0.52}Al_{0.48}As$ , которое по порядку величины соответствует энергии Ферми электронов в подзонах размерного квантования.

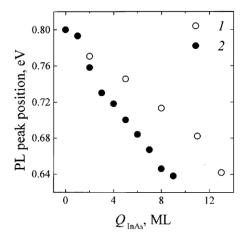


Рисунок 4.10 - Спектральное положение максимума линии ФЛ (77 K) от гетероструктур InAs/  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$  в зависимости от количества осажденного InAs  $Q_{InAs}$ : I – для двумерного распределения InAs [226], 2 – для островкового распределения InAs. Из работы [218].

## 4.2 Наногетероструктуры InGaAs/InAlAs на подложках InP с парными вставками InAs и/или GaAs в квантовой яме

### 4.2.1 Структура и условия получения экспериментальных образцов

В качестве подложек InP использовались легированные Fe полуизолирующие подложки с кристаллографической ориентацией  $(1\ 0\ 0)\pm0.1^\circ$  фирмы Wafer Technology Ltd. HEMTгетероструктуры с односторонним  $\delta$ -Si легированием включали в себя КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ , содержащую слои InAs и/или GaAs, ограниченную барьерными слоями  $In_{0.52}Al_{0.48}As$ . Исследовалось влияние введения пар вставок InAs и GaAs на электронные свойства составных КЯ. В таблице 4.7 представлено схематическое изображение поперечного сечения образцов с указанием толщин слоев и температуры роста. Для сравнительного анализа влияния введения в КЯ тонких субслоев InAs и/или GaAs был изготовлен базовый образец с однородной квантовой ямой  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$  толщиной 16 нм (образец № 2). Образцы с СКЯ от базового образца отличались тем, что внутрь КЯ были введены две вставки InAs толщиной 1.2 нм (образец № 3), переходные барьеры GaAs толщиной 1.1 нм (образец № 4) и комбинация барьеров GaAs и вставок InAs (образец № 5) при сохранении суммарной толщины СКЯ равной 16 нм. Слои GaAs (переходные барьеры) выращивались на границах СКЯ между слоями In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As и барьерными областями  $In_{0.52}Al_{0.48}As$ . Вставки InAs выращивались внутри слоев  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$  и располагались симметрично относительно центра СКЯ. Введение двух вставок проводилось для снижения эффективной массы электронов и, следовательно, улучшения электронного транспорта, а также для более плавного распределение механических деформаций в активной области гетероструктуры по сравнению с одиночной вставкой. Нанослои GaAs вводились на границах КЯ, поскольку предполагалось, что они будут действовать на электроны как барьеры, приводя к увеличению толщины спейсера и повышению подвижности.

Таблица 4.7 — Конструкция образцов 2-5 с парными вставками InAs и GaAs в КЯ: толщина d слоев и температура роста  $T_g$  (\* 460 °C — температура выращивания GaAs слоев)

	2	3	4	5	d, HM	$T_g$ , °C
Сар-слой		$i-In_{0.5}$	$_{53}Ga_{0.47}As$		6	490
Барьер		i-In <sub>0</sub>	<sub>52</sub> Al <sub>0.48</sub> As		30	490
Легирование		$\delta$ -Si, $N_{\rm Si}$	$= 1.6 \cdot 10^{12} \mathrm{cm}^{-2}$		-	490
Спейсер		i-In <sub>0.:</sub>	<sub>52</sub> Al <sub>0.48</sub> As		6.4	490
		InCoAc (4.5 mg)	GaAs (1.1 HM)	GaAs (1.1 HM)		
		InGaAs (4.5 нм)		InGaAs (3.5 HM)	İ	
Составная		InAs (1.2 нм)	InGaAs	InAs (1.2 нм)		120
квантовая	InGaAs	InGaAs (4.5 нм)		InGaAs (4.5 HM)	16	430 (460*)
яма		InAs (1.2 нм)	(13.8 нм)	InAs (1.2 HM)		(400)
		InCoAc (4.5 mg)		InGaAs (3.5 HM)		
		InGaAs (4.5 нм) GaAs (1.1 нм)		GaAs (1.1 нм)		
Буфер	$i-In_{0.52}Al_{0.48}As$					500
Подложка			InP		-	-

Предростовая подготовка подложек InP проводилась путем отжига в потоке молекулярного мышьяка  $As_4$  в эпитаксиальной камере при постепенном повышении температуры подложки со скоростью 5 °C/мин до 530 °C. Суммарное время отжига подложек при температурах 470 – 530 °C с последующим снижением до температуры роста буферного слоя  $T_g = 500$  °C составляло 15 минут. Структуры выращивались при соотношении парциальных давлений молекулярных потоков элементов V и III групп  $\gamma_1 = 64$  при выращивании слоёв InAlAs и  $\gamma_2 = 53$  при выращивании InGaAs. Температура роста понижалась до  $T_g = 430$  °C при выращивании слоев InAs и InGaAs составной КЯ и была одинаковой для всех образцов. Температура подложки при выращивании переходных барьеров GaAs (образцы Ne 4 и 5) равнялась 460 °C.

Таблица 4.8 - Электронные транспортные свойства образцов №2-5

№ образца	$\mu_e$ , cm <sup>2</sup> /(B·c)		$n_S$ , $10^{12}  \mathrm{cm}^{-2}$	
	300 K	77 K	300 K	77 K
2	16400	52800	1.40	1.39
3	8000	20100	1.23	1.16
4	10400	26900	1.07	1.08
5	8800	18000	1.35	1.29

В таблице 4.8 представлены значения холловской подвижности  $\mu_e$  и слоевой концентрации  $n_S$  ДЭГ при температурах 300 и 77 К. Концентрация электронов  $n_S$  в образцах

изменяется в диапазоне  $(1.1 - 1.4) \cdot 10^{12}$  см<sup>-2</sup>, хотя уровень легирования  $\delta$ -слоя кремнием был для всех образцов одинаковым. Из данных по подвижности  $\mu_e$  можно сделать вывод, что введение парных вставок GaAs и InAs для используемых конструкции КЯ и технологических режимов роста приводит к увеличению рассеяния электронов.

### 4.2.2 Электронная микроскопия

ПРЭМ изображения поперечных срезов образцов № 2–5 представлены на рисунке 4.11 [ 227 ]. Благодаря большой разнице в составах слоев, на изображениях гетероструктур проявляется сильный Z-контраст, позволяющий идентифицировать все слои KЯ – InGaAs, GaAs и InAs, а также барьеры InAlAs и подложку InP. На границе раздела барьер InAlAs – подложка InP на ПРЭМ изображениях выявляется светлая полоса, свидетельствующая об образовании промежуточного слоя, обогащенного тяжелыми атомами. Происхождение этого слоя (аналогично образцам 9Т-12Т), связано с процессом подготовки подложки к эпитаксиальному росту. При высокотемпературном отжиге подложки могут происходить такие явления, как замещение атомов  $P \leftrightarrow As$  и сегрегация атомов In, что приводит к возникновению слоя с повышенным содержанием InAs, который является неоднородным по толщине вдоль гетерограницы между подложкой и буфером.

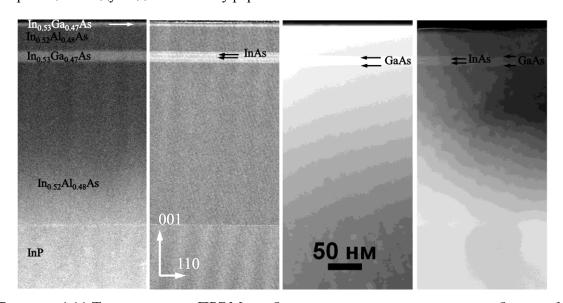


Рисунок 4.11 Темнопольные ПРЭМ-изображения поперечного сечения образцов № 2-5

На рисунке 4.12 представлены высокоразрешающие темнопольные ПРЭМ изображения областей составных КЯ исследуемых образцов, а также интегральные профили интенсивности сигнала ПРЭМ. Интегрирование сигнала производилось вдоль направления [1 1 0] (параллельно гетерограницам) по областям, отмеченными на рисунке 4.12 белыми прямоугольниками. Анализ ПРЭМ изображений наногетероструктур в области СКЯ не выявил дефектов кристаллической структуры.

Таблица 4.9 — Технологически заданные и измеренные толщины слоев КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  с парными вставками InAs и GaAs

	Состав слоя	Ростовые параметры, нм		Данные ПР	ЭМ, нм	
2	$In_{0.53}Ga_{0.47}As$	16.	0	16±1		
	$In_{0.53}Ga_{0.47}As$	4.5		4.5±0.5		
	InAs	1.2		1.5±0.5		
3	$In_{0.53}Ga_{0.47}As$	4.5	16	4±0.3	16±1	
	InAs	1.2		1.7±0.5		
	$In_{0.53}Ga_{0.47}As$	4.5		5±0.5		
	GaAs	1.1		1.2±0.5		
4	In <sub>0.53</sub> Ga <sub>0.47</sub> As	13.8	16	12±0.5	15±1.5	
	GaAs	1.1		1.2±0.5		
	GaAs	1.1		0.5±0.5		
	$In_{0.53}Ga_{0.47}As$	3.5		3.5±0.5		
	InAs	1.2		1.7±1.1		
5	$In_{0.53}Ga_{0.47}As$	4.5	16	4.2±0.5	16±1.5	
	InAs	1.2		1.7±1.1		
	$In_{0.53}Ga_{0.47}As$	3.5		2.6±0.3		
	GaAs	1.1		1±0.5		

Результаты измерения толщин слоев представлены в таблице 4.9, там же представлены технологически заданные толщины. Ширины квантовых ям, оцененные по данным ПРЭМ изображениям, составляют 16±1 нм. Толщины нанометровых вставок InAs и GaAs хорошо согласуются с технологически заданными значениями. По видимому, снижение температуры роста составной КЯ до 430 °C (460 °C для слоев GaAs) препятствовало значительному размытию слоев InAs и GaAs, если сравнивать с образцами 9Т-12Т.

Для всех образцов в изображениях ПРЭМ наблюдается четкий контраст между барьерными слоями In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As и составной КЯ. Размытость границ раздела, вызванная диффузией элементов III группы Al, Ga, In между различными слоями при эпитаксиальном росте, характеризуется толщиной переходного слоя. Ширина границ раздела InAlAs/КЯ оценивалась по наклону интегрального профиля интенсивности. Для образцов № 2 и № 3 без переходных барьеров GaAs ширина границы In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As/In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As составляла 1.0 нм. Области гетерограниц InAlAs/GaAs/КЯ, содержащих переходные барьеры GaAs, в образцах № 4 и № 5 более размыты. Z-контрастное изображение идеального слоя GaAs должно быть более темным по сравнению с окружающими слоями In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As и In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As. Такая особенность наблюдается на снимках ПРЭМ образца №5. Для образца №4 интенсивность сигнала ПРЭМ на гетерограницах InGaAs/InAlAs монотонно возрастает от слоев InAlAs к слоям InGaAs на длинах порядка 2.5 нм, и вставка GaAs на снимках четко не выделена. Это говорит о фазовом перемешивании на границах раздела InGaAs/InAlAs в области вставки GaAs.

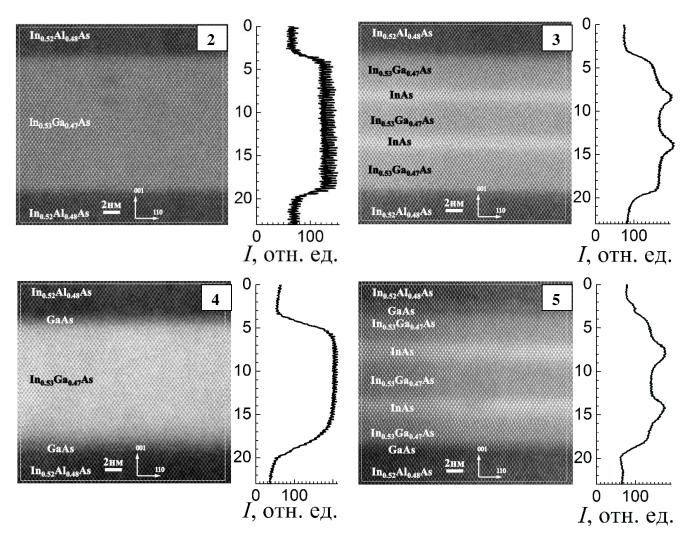


Рисунок 4.12 – ПРЭМ изображения области КЯ InGaAs/InAlAs с парными вставками InAs и/или GaAs; рядом с ПРЭМ изображением приведён соответствующий интегральный профиль интенсивности сигнала ПРЭМ

Контраст внедренных вставок InAs в образцах № 3 и № 5 на рисунке 4.12 наблюдается отчетливо. Толщина вставок была оценена по интегральным профилям интенсивности сигнала ПРЭМ, принималась ширина на полувысоте пика. Толщина верхней и нижней вставок для образца № 3 составляла  $1.5 \pm 0.5$  нм и  $1.7 \pm 0.5$  нм, соответственно, а для образца № 5 толщина обеих вставок InAs оказалась равной  $1.7 \pm 0.5$  нм, толщина вставок немного превышает технологически заданные значения. Размытие границ раздела InAs/In $_{0.53}$ Ga $_{0.47}$ As составляло около 2 монослоев InAs с каждой стороны нановставки.

Так как на снимках ПРЭМ не были обнаружены протяженные структурные дефекты – дислокации, дефекты двойникования и др., которые наиболее часто формируются при релаксации напряженных слоев, то наблюдаемое снижение подвижности в образцах №3-5, скорее всего, связано с рассеянием на шероховатостях гетерограниц и флуктуациях состава твердых растворов. Наибольшее снижение подвижности по сравнению с образцом №2

наблюдается для образцов №3 и №5, содержащих вставки InAs. Введение двух тонких слоев InAs вблизи центра КЯ приводит к формированию четырех новых гетерограниц в области локализации ДЭГ. Рассеяние на структурных неоднородностях, связанных с этими слоями InAs, компенсирует такие факторы, приводящие к повышению подвижности, как уменьшение массы электронов в КЯ со вставками InAs и уменьшение хвостов волновой функции электронов в барьере InAlAs.

## 4.2.3 Спектроскопия фотолюминесценции наногетероструктур InGaAs/InAlAs на подложках InP с парными вставками InAs и/или GaAs

На рисунке 4.13 представлены обзорные спектры  $\Phi$ Л исследуемых образцов при  $T=87~\rm K$  в диапазоне энергий фотонов  $0.6~\rm pB < \hbar\omega < 1.7~\rm pB$ , на которых проявляются четыре диапазона с отчетливыми особенностями в спектрах  $\Phi$ Л. Сопоставление данных диапазонов с энергиями запрещенной зоны в различных слоях и с расчетными энергиями переходов между подзонами KЯ позволяет определить происхождение групп пиков: диапазон  $0.6-0.9~\rm pB$  относится к оптическим переходам в KЯ,  $0.9-1.3~\rm pB-k$  рекомбинации электронов и дырок на гетерогранице InAlAs (буферный слой)/InP (подложка),  $1.35-1.45~\rm pB-k$  межзонной люминесценции в подложке InP и переходам с участием примесей в InP,  $1.5-1.6~\rm pB-k$  буферному слою InAlAs.

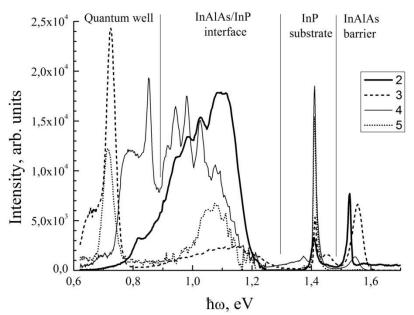


Рисунок 4.13 - Спектры ФЛ МЛГ InGaAs/InAlAs с парными вставками InAs и/или GaAs в КЯ. Вертикальные линии разделяют области спектра от различных слоев наногетероструктур

Рассмотрим более подробно оптические переходы в диапазоне 0.6-0.9 эВ, соответствующем рекомбинации двумерного электронного газа и фотовозбужденных дырок в СКЯ. В таблице 4.10 представлены энергетические положения ( $\hbar\omega$ )<sub>max</sub> пиков ФЛ, а также

значения ширины на уровне половинной амплитуды этих пиков  $\Delta(\hbar\omega)_{1/2}$ . Как видно из рисунка 4.13, спектры ФЛ для образцов различаются интенсивностью, формой спектров, а также количеством пиков и энергетическим положением максимумов. Эти отличия, скорее всего, обусловлены конструкционными особенностями составных КЯ, так как технологические режимы роста для всех образцов были одинаковыми. Так, образцы № 4 и 5, содержащие нанослои GaAs по краям СКЯ, имеют меньшую толщину узкозонного слоя InGaAs (~ 138 Å) по сравнению с образцами № 2 и 3, соответственно. Ширины запрещенных зон GaAs при 77К (1.51 эВ) и In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As (1.52 эВ) близки, поэтому слои GaAs служат переходными барьерами для электронов в СКЯ InAlAs/InGaAs/InAlAs. Модификации конструкции СКЯ путем введения субслоев GaAs должны приводить к увеличению энергии размерного квантования электронов и дырок и вызывать синее смещение линий фотолюминесценции, однако экспериментально наблюдается противоположное: пик ФЛ от СКЯ при сравнении в парах образцов № 2 — № 4 и №3 — № 5 сдвигается в сторону меньших энергий.

Таблица 4.10 — Положение  $(\hbar\omega)_{max}$  и полуширина  $\Delta(\hbar\omega)_{1/2}$  пиков ФЛ от КЯ InGaAs/InAlAs с парными вставками InAs и/или GaAs

Образец №	$(\hbar\omega)_{\rm max}$ , $\ni B$	$\Delta(\hbar\omega)_{1/2}$ , мэВ
2	0.820	110
3	0.678	113
	0.726	33
4	0.794	83
	0.852	24
5	0.717	40

Положение основной полосы в спектрах ФЛ от составной КЯ образцов № 3 и № 5, содержащих парные вставки InAs, сдвигается приблизительно на 100 мэВ в сторону меньших энергий по сравнению с образцами № 2 и № 4, соответственно, как видно из рисунка 4.13. Меньшее значение энергий переходов в образцах со вставками InAs, по нашему мнению, связано с увеличением средней мольной доли индия в КЯ и уменьшением эффективной ширины запрещенной зоны, что согласуется с данными [228].

Рассмотрим спектры ФЛ в диапазоне энергий фотонов от 0.9 до 1.3 эВ. Этот диапазон соответствует излучательной рекомбинации электронов и дырок вблизи границы раздела буфер InAlAs/подложка InP, зонная структура которой — гетеропереход II рода. Как уже описано в разделе 4.1, согласно опубликованным данным, энергия оптических переходов на гетерогранице InAlAs/InP может варьироваться в широком диапазоне энергий фотонов от 1.0 до 1.35 эВ, а пики ФЛ могут обладать шириной порядка нескольких десятых эВ. Значительный разброс опубликованных значений энергии данного перехода объясняется неидеальностью гетерограницы InAlAs/InP, обусловленной образованием переходных субслоев из

полупроводниковых твердых растворов со сложным элементным профилем, который зависит от технологических условий формирования интерфейса InAlAs/InP во время предростовой подготовки подложки InP и начального процесса эпитаксиального роста буфера InAlAs.

Из рисунка 4.13 видно, что наблюдаемые в диапазоне энергий 0.9 – 1.3 эВ полосы ФЛ обладают значительной шириной и частично перекрываются с переходами от составных КЯ. Для точного определения природы и идентификации данных полос для всех образцов № 2-5 было проведено последовательное жидкостное селективное стравливание слоев наногетероструктур до подложки и измерение спектров ФЛ после каждого этапа травления. На рисунке 4.14 представлены спектры  $\Phi$ Л при  $T=87~{\rm K}$  образцов № 2 и № 4 до и после удаления слоев КЯ. Отличие спектров на рисунках 4.13 и 4.14 (до стравливания СКЯ) объясняется измерениями на различных участках эпитаксиальной пластины. Исчезновение из спектров ФЛ после удаления слоев InGaAs линий, приведенных в таблице 4.10, подтверждает, что переходы в диапазоне 0.7 – 0.9 эВ связаны с рекомбинацией носителей заряда в КЯ. После стравливания КЯ фотогенерированные носители в основном захватываются и термализуются в области гетерограницы и интенсивность полосы ФЛ 0.9 - 1.3 эВ увеличивается приблизительно в 3 раза. После полного стравливания буферного слоя InAlAs и переходных слоев на гетерогранице InAlAs/InP до подложки InP из спектров ФЛ всех исследованных образцов исчезала полоса 0.9 – 1.3 эВ и сохранялись только линии в области 1.35 – 1.45 эВ, связанные с рекомбинацией носителей заряда в подложке.

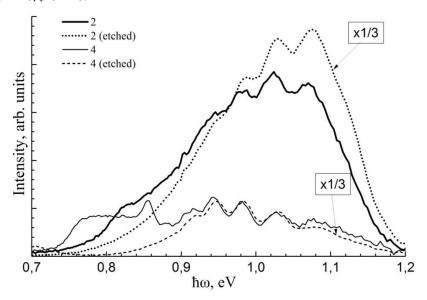


Рисунок 4.14 - Спектры ФЛ образцов № 2 и № 4 до (сплошная линия) и после (пунктир) стравливания слоев КЯ

На рисунке 4.15 представлены зависимости интенсивности в максимуме сигнала ФЛ от мощности лазерной накачки для оптических переходов в КЯ ( $\hbar\omega\approx0.82$  эВ) и вблизи гетерограницы InAlAs/InP ( $\hbar\omega\approx1.09$  эВ) для базового образца № 2. Видно, что максимальная

интенсивность обоих пиков растет линейно с увеличением мощности возбуждения  $P_W$ . При этом ширина пика при 1.09 эВ на полувысоте почти не зависит от  $P_W$  (240 мэВ при  $P_W = 62,5 \; \mathrm{Bt/cm^2}$  и 230 мэВ при  $P_W = 250 \; \mathrm{Bt/cm^2}$ ), а положение максимума пиков не изменяется. Подобное поведение энергии и интенсивности сигнала ФЛ для диапазона  $0.9 - 1.3 \; \mathrm{эВ}$  от мощности лазерного возбуждения наблюдалось для всех образцов и характерно для пространственно прямых межзонных переходов в квантовых ямах.

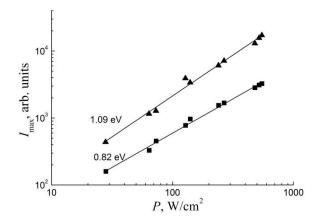


Рисунок 4.15 - Зависимость интенсивности линий ФЛ  $\hbar\omega$  = 0.82 эВ и  $\hbar\omega$  = 1.09 эВ от плотности мощности накачки для образца № 2

Линейную зависимость интенсивности  $\Phi$ Л I от мощности накачки P для линий  $\Phi$ Л KЯ и гетерограницы InP/InAlAs можно объяснить следующим образом [229]. Вблизи гетерограницы спектры  $\Phi$ Л соответствуют рекомбинации экситонов. Кинетическое уравнение для рекомбинации в этом случае имеет следующий вид:

$$\frac{dN_X}{dt} = G - \frac{N_X}{\tau_X},\tag{4.2}$$

где  $N_{\rm X}$  — плотность экситонов вблизи гетероперехода, G — скорость генерации электроннодырочных пар,  $\tau_{\rm X}$  — время жизни экситона. В стационарных условиях:

$$N_{\rm X} = G \cdot \tau_{\rm X}.\tag{4.3}$$

Интенсивность излучения экситонной рекомбинации пропорциональна энергии экситона и числу экситонов, рекомбинировавших в единицу времени:

$$I \sim E_X \cdot \frac{N_X}{\tau_{X,R}} = E_X \cdot \frac{\tau_X}{\tau_{X,R}} \cdot G, \qquad (4.4)$$

где  $\tau_{X,R}$  – время жизни экситона при излучательной рекомбинации. Поскольку темп генерации экситонов  $G \sim P$ , то и интенсивность рекомбинации  $I \sim P$  (формула 4.4).

В спектрах ФЛ от КЯ доминирующим механизмом является излучательная рекомбинация свободных двумерных электронов и дырок. Уравнение кинетики рекомбинации этом случае имеет вид:

$$\frac{dn}{dt} = G - Bpn - \frac{1}{\tau_{e,NR}}n,\tag{4.5}$$

где n, p — плотность электронов и дырок в КЯ, B — скорость излучательной рекомбинации,  $\tau_{e,NR}$  — время жизни электрона при безызлучательной рекомбинации. В стационарных условиях:

$$G = Bpn + \frac{n}{\tau_{e,NR}}. (4.6)$$

Обычно безызлучательные процессы преобладают и первым слагаемым в (4.6) можно пренебречь. В случае сильного возбуждения (а также в нелегированных структурах) концентрация собственных носителей заряда меньше плотности фотовозбужденных, поэтому при возбуждении люминесценции  $n \sim p$ , а интенсивность  $\Phi \Pi$ :

$$I \sim Bnp = Bn^2 = BG^2 \tau_{eNR}^2, \tag{4.7}$$

откуда следует, что  $I \sim P^2$ . Для случая слабого возбуждения в легированных структурах изменением плотности основных носителей заряда при фотовозбуждении можно пренебречь. Тогда из выражений (4.6) и (4.7) следует линейная зависимость I от P, как в наблюдаемом случае для образцов 2-5. Дополнительным подтверждением слабого уровня возбуждения является независимость формы спектров ФЛ образцов 2-5 от мощности накачки P во всем исследуемом диапазоне. Если бы возбуждение было сильным, то при увеличении P должен бы был наблюдаться эффект заполнения зон и соответствующее увеличение ширины пиков ФЛ.

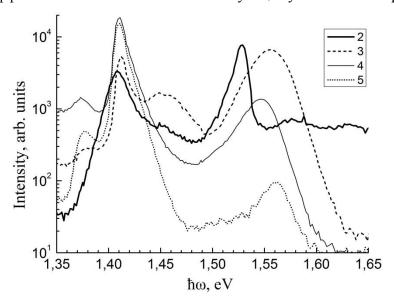


Рисунок 4.16 - Спектры ФЛ гетероструктур InGaAs/InAlAs в диапазоне 1.35-1.65 эВ

Наблюдаемые в спектрах  $\Phi$ Л особенности в области энергий фотонов 1.33 - 1.65 эВ (рисунок 4.16) относятся к оптическим переходам в подложке InP и буферном слое InAlAs и аналогичны спектрам  $\Phi$ Л образцов 9Т-12Т. Узкий пик при  $\hbar\omega=1.41$  эВ соответствует экситонной рекомбинации в InP, «плечо» в области более высоких энергий (и пик при  $\hbar\omega=1.41$  эв соответствует

1.45 эВ для образца № 3) — межзонной рекомбинации свободных электронов и дырок в InP, а пик при 1.38 эВ — переходу с участием примесного уровня Fe, так как подложки InP были намеренно легированы Fe для придания им полуизолирующих свойств.

В энергетическом положении межзонного перехода от слоя InAlAs при 1.5-1.6 эВ от различных образцов наблюдается небольшой разброс, связанный с точностью и воспроизводимостью технологических условий роста. В таблице 4.11 представлены энергетические положения максимумов пиков ( $\hbar\omega$ )<sub>тах</sub>, значения ширины пиков на полувысоте  $\Delta(\hbar\omega)_{1/2}$  и мольные доли индия x в тройном растворе  $In_xAl_{1-x}As$ , определенные по зависимости ширины запрещенной зоны  $In_xAl_{1-x}As$  от состава (формула 4.1).

Образец №  $(\hbar\omega)_{\rm max}$ ,  $\ni B$  $\Delta(\hbar\omega)_{1/2}$ , мэВ 1.535 0.513 2 25 3 39 1.556 0.504 4 1.546 35 0.508 5 1.562 30 0.502

Таблица 4.11 - Положение и полуширина пиков  $\Phi \Pi$  от буферного слоя  $In_xAl_{1-x}As$ 

Представленные в таблице 4.11 результаты показывают, что мольная доля x в  $In_xAl_{1-x}As$  отличалась от значения в решеточно-согласованном к подложке InP твердом растворе  $In_{0.52}Al_{0.48}As$  не более чем на 0.02, а в процессе эпитаксиального роста состав твердого раствора  $In_xAl_{1-x}As$  выдерживался с точностью  $\Delta x < 0.01$ .

## 4.2.4 Моделирование зонной структуры квантовых ям InGaAs/InAlAs с парными вставками InAs и/или GaAs

Для анализа энергий оптических переходов рассчитывались состояния электронов и дырок в составных КЯ на основе решения самосогласованной системы уравнений Шредингера-Пуассона. На рисунке 4.17 представлены рассчитанные пространственные профили краев зон  $E_{\rm C}(z)$ ,  $E_{{\rm V},hh}(z)$  и  $E_{{\rm V},hh}(z)$ , а также энергии  $E_{\alpha i}$  и квадраты огибающих ВФ  $\Psi_i^{\ 2}$  основных состояний электронов и дырок в КЯ для образцов № 2 – 5 (энергия отсчитывается от уровня Ферми  $E_{\rm F}=0$  эВ). Концентрация легирующей примеси выбиралась такой, чтобы плотность электронного газа в составных КЯ была равна  $1.4\cdot10^{12}$  см $^{-2}$  в соответствии с экспериментальными измерениями эффекта Холла и электропроводности. При такой плотности электронов для всех образцов ниже уровня Ферми располагается один электронный уровень  $E_{e1}$ , поэтому ДЭГ, в основном, заполняют первую подзону размерного квантования.

Действие переходных барьеров GaAs и вставок InAs на состояния электронов и дырок характеризуется величиной разрывов зоны проводимости и валентных зон на границах этих слоев с InGaAs и InAlAs. Существенное влияние на положение краев зон в тонких вставках

GaAs и InAs оказывают тетрагональные упругие напряжения, которые приводят к изменению ширины запрещенной зоны по сравнению с объемным значением и к расщеплению валентной зоны. Так, слой InAs, параметр решетки которого больше, чем у подложки InP, оказывается подвержен двухосному сжатию в плоскости роста и одноосному растяжению в поперечном направлении. Под действием деформаций расстояние от зоны проводимости до валентных зон в InAs увеличивается, и край валентной зоны тяжелых дырок оказывается выше по энергии на 0.16 эВ края зоны легких дырок. Параметр решетки GaAs, наоборот, меньше, чем у подложки InP, поэтому смещение краев зон под действие деформаций противоположное — ширина запрещенной зоны уменьшается, и выше по энергии оказывается край зоны легких дырок. Таким образом, потенциальный профиль энергетических зон  $E_a(z)$  в составных КЯ для легких и тяжелых дырок за счет расщепления валентной зоны во вставках InAs и GaAs различается. Относительное положение краев зон проводимости и валентных зон в полупроводниках GaAs, InAs, In $_{0.52}$ Al $_{0.48}$ As и In $_{0.53}$ Ga $_{0.47}$ As, использовавшееся при расчетах, приведено на рисунке 2.10.

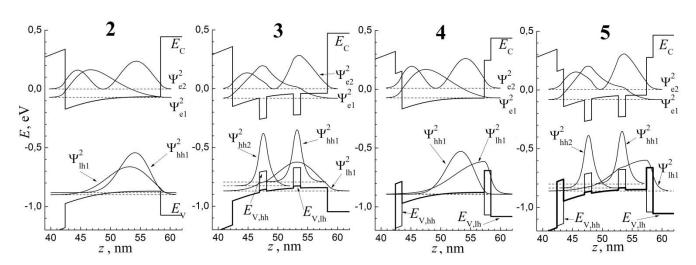


Рисунок 4.17 - Зонные диаграммы составных КЯ InGaAs/InAlAs, содержащих парные вставки InAs и/или GaAs:  $E_{\alpha}$  – профили краев зон,  $\Psi_{i}^{2}$  – квадраты ВФ электронов и дырок, уровни энергии обозначены пунктиром

Рассмотрим влияние введения слоев InAs и GaAs на волновые функции и энергии носителей заряда в составных КЯ. В таблице 4.12 приведены рассчитанные энергии и вероятности межзонных оптических переходов для составных КЯ различных конструкций. На симметрию ВФ электронов и дырок существенное влияние оказывает изгиб зон в области КЯ, связанный с потенциалом дельта-слоя ионизированных доноров (рисунок 4.17). Электрическое поле доноров приводит к наклону зон в КЯ, в результате чего электроны локализуются вблизи верхней границы КЯ ближе к дельта-слою примесей, а дырки — вблизи нижней. Поэтому ограничение по четности на разрешенные межзонные оптические переходы, которое

накладывается в прямоугольных КЯ с симметричным потенциалом, в одностороннелегированных структурах снимается. Переходы между электронными и дырочными уровнями с номерами различной четности становятся разрешенными.

Таблица 4.12 — Рассчитанные энергии оптических переходов  $E_{ei}$  -  $E_{hj}$  и интегралы перекрытия ВФ электронов и дырок в КЯ InGaAs/InAlAs с парными вставками InAs и GaAs

Образец №	$E_{ei}$ - $E_{hj}$ , э ${ m B}$	$ M ^2$	Тип перехода
2	0.811	0.390	e1-hh1
	0.828	0.640	e1-lh1
	0.881	0.584	e2-hh1
	0.899	0.353	e2-lh1
3	0.713/0.745	0.303/0.516	e1-hh1/e1-hh2
	0.788	0.677	e1-lh1
	0.793/0.825	0.524/0.172	e2-hh1/e2-hh2
4	0.815	0.476	e1-lh1
	0.820	0.514	e1-hh1
	0.897	0.374	e2-lh1
	0.902	0.468	e2-hh1
5	0.716/0.750	0.330/0.523	e1-hh1/e1-hh2
	0.776	0.502	e1-lh1
	0.804/0.838	0.516/0.228	e2-hh1/e2-hh2

Рассчитанная энергия перехода из основной подзоны электронов e1 в подзоны легких lh1 и тяжелых hh1 дырок для базового образца без вставок № 2 находится в хорошем согласии с экспериментом. Энергия краев подзон тяжелых и легких дырок различается из-за различия эффективных масс и энергий размерного квантования. Основным состоянием дырок является подзона hh1, уровень которой практически совпадает с дном валентной зоны в КЯ. В спектрах может присутствовать полоса с участием второй подзоны электронов e2-hh1 и e2-lh1, но из-за перекрытия спектров ФЛ от гетерограницы InAlAs/InP и КЯ (рисунок 4.14), невозможно установить, присутствуют ли она.

При введении вставок InAs в составную КЯ для электронов образуются дополнительные потенциальные ямы, которые приводят к перераспределению электронной плотности, появлению локальных максимумом ВФ электронов в слоях InAs, и понижению энергии основного уровня в КЯ. Для тяжелых и легких дырок вставки InAs также формируют дополнительные потенциальные ямы по отношению к InGaAs. Наиболее существенное влияние слои InAs оказывают на состояния тяжелых дырок, которые, благодаря высокой эффективной массе, могут локализоваться внутри вставок InAs толщиной порядка 10 Å. В спектре тяжелых дырок образуется два уровня квантования, энергии которых выше края зоны проводимости в InGaAs. Из рисунка 4.17 видно, что волновые функции основного и первого возбужденного состояния тяжелых дырок локализованы, соответственно, в нижней и верхней вставках и почти

не перекрываются между собой. Отсутствие связанных гибридизированных состояний тяжелых дырок в системе двух вставок связано с электрическим полем доноров, приводящим к снижению симметрии потенциальной энергии дырок в СКЯ.

Парный характер состояний тяжелых дырок в слоях InAs является важным фактором при рассмотрении спектров ФЛ образцов № 3 и № 5. Из таблицы 5 видно, что ВФ состояния e1 значительно сильнее перекрывается с ВФ тяжелых дырок hh2, локализованной в верхней вставке InAs, чем с ВФ hh1, поэтому вероятность излучательной рекомбинации, которая пропорциональна  $|M|^2$ , с участием состояния hh2 больше. С другой стороны, подзона hh2 расположена выше по энергии для дырок, чем подзона hh1, поэтому она обладает меньшей концентрацией дырок. Можно ожидать, что из-за слабой туннельной связи состояний hh1 и hh2, время перехода дырки из подзоны hh2 в подзону hh1 будет значительно больше, чем время внутриподзонной релаксации дырок в состояние с наименьшей энергией за счет испускания фононов. В этих условиях концентрация дырок в подзоне hh2 будет сравнима с подзоной hh1, и на спектрах ФЛ будут наблюдаться переходы с участием дырок обеих подзон. Таким образом, пик ФЛ образца № 3 при 0.68 эВ, обладающий значительной полушириной, являясь суммой оптических переходов e1-hh1 и e1-hh2.

В результате локализации тяжелых дырок внутри слоев InAs в образцах со вставками № 3 и № 5 энергия оптического перехода e1-hh1 снижается по сравнению с образцами без InAs. Рассчитанные энергии оптических переходов для образцов № 3 и № 5 недостаточно точно описывает экспериментальные спектры ФЛ. Полученное расхождение экспериментом могло возникнуть из-за несоответствия реального элементного профиля (толщин слоев) в гетероструктурах технологически заданному (испольемому моделировании). В работе [226] исследовались оптические свойства нелегированных КЯ InGaAs/InAs/InGaAs с различной толщиной слоя InAs и было обнаружено увеличение расхождения экспериментальных и рассчитанных энергий оптических переходов при уменьшении толщины InAs до нескольких монослоев, что связано с увеличением влияния шероховатости гетерограниц и, следовательно, флуктуаций толщины слоя InAs на энергии состояний носителей заряда по мере снижения толщин слоев гетероструктур. На рисунке 4.18 а приведена зависимость энергий межзонных переходов в составной КЯ образца № 3 при вариации толщин вставок InAs. Сдвиг линий оптических переходов при изменении толщины InAs, в основном, происходит за счет зависимости энергий размерного квантования состояний hh1 и hh2 тяжелых дырок внутри слоев InAs. Рассчитанные энергии переходов хорошо описывают эксперимент при толщине вставок InAs 17-18 Å, что на 2 – 3 монослоя больше технологически заданной толщины и находится в хорошем согласии с измерениями ПРЭМ.

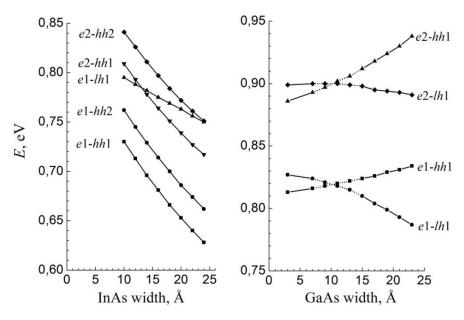


Рисунок 4.18 - Зависимость энергий межзонных оптических переходов от толщин вставок InAs (слева) и GaAs (справа) в составной КЯ образцов № 3 и № 4, соответственно

Переходные слои GaAs в образцах № 4 и № 5 являются барьерами для электронов и тяжелых дырок, они уменьшают ширину потенциальной ямы с 160 Å до 138 Å и увеличивают энергию размерного квантования для этих носителей заряда, что приводит к увеличению энергии перехода e1-hh1 на 10 мэВ. Для легких дырок GaAs формирует потенциальную яму по отношению к InGaAs на границах составной КЯ. В результате уровень энергии легких lh1 дырок поднимается выше hh1 и становится основным уровнем для дырок, т.е. происходит инверсия взаимного положения краев подзон легких и тяжелых дырок. На рисунке  $4.18~\delta$ приведена рассчитанная зависимость энергий межзонных переходов образца № 4 при вариации толщины переходных барьеров GaAs. Видно, что при увеличении толщины слоя GaAs энергия оптических переходов с участием тяжелых дырок возрастает, а легких дырок, наоборот, уменьшается. Инверсия положения уровней *lh*1 и *hh*1 происходит при толщине слоев GaAs более 10 Å, и основным оптическим переходом становится e1-lh1. На рисунке 4.18 кривые вблизи пересечения энергий переходов  $e^{1-hh1}$  и  $e^{1-lh1}$ ,  $e^{2-hh1}$  и  $e^{2-lh1}$  обозначены пунктиром. В окрестности точек пересечения из-за совпадения рассчитанных уровней энергии тяжелых и легких дырок должны образовываться гибридизованные состояния из линейной комбинации ВФ легких и тяжелых дырок. В этом случае должен происходить антикроссинг подзон размерного квантования дырок и для определения зависимости энергий переходов от толщин слоев приближение независимых дырочных зон неприменимо, должно использоваться многозонное приближение огибающей ВФ. Таким образом, сдвиг спектров ФЛ для образца № 4 в сторону меньших энергий по сравнению с образцом № 2 объясняется образованием

потенциальной ямы для легких дырок в слое GaAs. Рассчитанные энергии переходов близки к эксперименту при толщине вставок GaAs порядка 20 Å.

### 4.2.5 Обсуждение результатов

На основе анализа состояний носителей заряда в составных КЯ и экспериментальных спектров ФЛ показано, что использование тонких вставок GaAs и InAs позволяет эффективно управлять энергией и ВФ дырок в наногетероструктурах InGaAs/InAlAs на подложках InP и, следовательно, оптическими свойствами гетероструктур. Введение вставок InAs приводит к увеличению амплитуды ВФ электронов и локализации тяжелых дырок в области вставок. При этом энергия ФЛ снижается (в основном, за счет сдвига вверх энергии тяжелых дырок), а интенсивность ФЛ возрастает за счет усиления перекрытия электронной и дырочной ВФ. Парный характер уровней тяжелых дырок из-за раздельной локализации состояний в каждой из вставок при слабой туннельной связи приводит к уширению линии фотолюминесценции СКЯ.

Введение переходных слоев GaAs создает барьеры для тяжелых дырок. Вставки GaAs, помещенные на гетерогранице InGaAs/InAlAs, уменьшают ширину КЯ для тяжелых дырок, но оказывает незначительное влияние на энергию подзон тяжелых дырок. Для легких дырок слои GaAs, напротив, создают потенциальную яму и приводят к сдвигу вверх краев подзон. Интересно отметить, что в СКЯ с переходными барьерами GaAs ширина и глубина потенциальной ямы для легких дырок может быть заметно выше, чем для тяжелых дырок. Это приводит при достаточной толщине вставки (10 Å, если вставка расположена на границе InGaAs/InAlAs) к инверсному положению дырочных подзон в СКЯ, при котором основной является подзона легких дырок. Идея получения инвертированного расположения подзон легких и тяжелых дырок при помощи упругих напряжений в КЯ InAlAs/InGaAs/InAlAs предлагалась в нескольких работах [230, 231]. Для этого мольная доля x индия в слое  $In_xGa_{1-x}As$ уменьшалась по сравнению с решеточно-согласованным к подложке InP значением (x = 0.53), и из-за двухосного растяжения слоя  $In_xGa_{1-x}As$  край валентной зоны легких дырок сдвигался вверх относительно тяжелых дырок. При этом в гетероструктурах наблюдалось существенное увеличение коэффициента поглощения инфракрасного излучения на межподзонных переходах в валентной зоне, что стало использоваться для получения инфракрасных детекторов. Основное отличие нашей работы состоит в том, что для получения инверсного состояния дырок КЯ предлагается использовать тонкие (1 нм) напряженные вставки GaAs InAlAs/InGaAs/InAlAs.

Рассмотрим природу спектров  $\Phi \Pi$  от границы раздела InAlAs/InP в диапазоне энергий 0.9-1.3 эВ. Можно выделить несколько особенностей наблюдаемых спектров  $\Phi \Pi$ . Во-первых, наблюдается тонкая структура полосы 0.9-1.3 эВ, причем форма спектров в исследуемых

образцах существенно различается. Во-вторых, максимальная интенсивность сигнала ФЛ для некоторых образцов (№ 2, 4 и 5) превышает или сравнима с интенсивностью сигнала ФЛ от СКЯ. В третьих, наблюдается линейная зависимость интенсивности ФЛ от мощности накачки. Указанные особенности не характерны для гетеропереходов ІІ рода и указывают на формирование дополнительной квантовой ямы между слоями InAlAs и InP с гетеропереходом I рода. Как уже обсуждалось при анализе спектров ФЛ образцов 9Т-12Т, подобные особенности в спектрах ФЛ могут проявляться в случае формирования тонкого переходного слоя InAs на гетерогранице InAlAs/InP во время предростового отжига подложки InP в результате замещения атомов Р атомами As и сегрегации атомов In, которая привела к обогащению индием приповерхностного слоя. При этом в результате случайных процессов образовалась нерезкая гетерограница, содержащая переходный слой InAs между InAlAs и InP с флуктуирующей толщиной. Толщина и латеральная однородность этого субслоя зависят от таких параметров, как температура и время отжига, давление мышьяка при отжиге подложки. При этом, возможно, замещение атомов Р атомами As на поверхности подложки было неполным и образовался твердый раствор InAsP со сложным пространственным профилем состава. Также возможна сегрегация In из субслоя InAs в InAlAs на начальном этапе роста буфера, приводящая к обогащению индием нижних слоев буферного слоя.

Образование на границе раздела InAlAs/InP переходной квантовой ямы приводит к увеличению интенсивности оптических переходов за счет увеличения перекрытия электронных и дырочных ВФ и к сдвигу соответствующего пика в спектре ФЛ в сторону меньших энергий по сравнению с идеальным гетеропереходом II рода. Образцы №2-5 от образцов 9Т-12Т отличались тем, что при предростовой подготовке подложек была увеличена максимальная температура отжига до 530 °C, что привело к увеличению толщины переходного слоя и, следовательно, смещению пика ФЛ от гетерограницы в область энергий 0.9 − 1.2 эВ. Наблюдаемая тонкая структура полосы 0.9 − 1.3 эВ и распределение пиков по энергиям, мы полагаем, вызваны флуктуациями толщины тонкого слоя InAs или же образованием островков InAs разных размеров на границе InAlAs/InP. Изменения энергии оптических переходов за счет эффектов размерного квантования при последовательном изменении толщины InAs на 1 монослой наблюдаются в виде отдельных пиков на спектрах ФЛ.

В качестве подтверждения того, что наблюдаемые пики ФЛ от гетерограницы InAlAs/InP соответствуют оптическим переходам в переходном слое InAs с флуктуирующей толщиной, можно привести литературные данные. В работе [232] наблюдались близкие по форме и энергетическому положению широкие полосы ФЛ, состоящие из ряда острых пиков, от гетероструктур, содержащих тонкий слой InAs (2.5 монослоя), нанесенный на подложку InP. Наличие множественных компонент в спектрах ФЛ такого InAs слоя было объяснено

флуктуациями толщины слоя от 3 до 9 монослоев, происходящими на величину в 1 монослой. В работе [233] обнаружены широкие многокомпонентные спектры ФЛ в диапазоне 0.9-1.3 эВ (при 10 К) от поверхностных КЯ InAs/InP, полученных отжигом подложки InP в потоке молекул As<sub>4</sub>. В работе [234] сравниваются спектры ФЛ от гетеропереходов InAlAs/InP и гетероструктур, в которых сежду слоем InAlAs и InP вводился тонкий слой InAs. Показано, что спектры таких структур имеют близкую форму и энергетическое положение, и что положение пика ФЛ от гетероструктуры InAlAs/InAs/InP сдвигается в сторону меньших энергий при увеличении толщины слоя InAs.

#### Выводы

Таким образом, в ходе исследования электронных свойств МЛГ InGaAs/InAlAs на подложках InP было обнаружено:

- положение пика ФЛ от КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ , содержащей в центре вставку InAs, смещается в сторону меньших энергий при увеличении толщины  $L_{InAs}$  слоя InAs в диапазоне от 1.7 до 3.0 нм. Интенсивность соответствующего оптического перехода и подвижность электронов в КЯ немонотонно зависят от  $L_{InAs}$  и максимальны при  $L_{InAs} = 2.1$  нм;
- изменение оптических свойств (формы, количества и положения пиков в спектрах  $\Phi \Pi$ ) КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  при введении слоев GaAs и InAs обусловлено влиянием вставок InAs и GaAs на энергию и пространственную конфигурацию  $B\Phi$  легких и тяжелых дырок;
- интенсивность полосы  $\Phi Л$  от гетерограницы  $In_{0.52}AI_{0.48}As/InP$  возрастает, а положение смещается в сторону меньших энергий при увеличении длительности и температуры предростового отжига подложки InP в потоке молекул  $As_4$ . Это обусловлено образованием на поверхности подложки InP переходного слоя-KЯ в результате замещения атомов P атомами As при высокотемпературном отжиге.

Расщепление потолка валентной зоны в упруго напряженных наноямах InAs и нанобарьерах GaAs позволяет раздельно управлять энергией оптических переходов от подзон тяжелых и легких дырок в гетероструктурах на основе InGaAs/InAlAs на подложках InP за счет изменения толщины и положения вставок. Высокая чувствительность энергий дырок к толщине вставок указывают на то, что особое внимание необходимо уделять технологии получения гетероструктур со вставками, контролю толщин слоев с точностью до 1 монослоя. Также толщина вставок не должна превышать критическую толщину, при которой происходит релаксация упругих напряжений с образованием дефектов. Размытие гетерограниц вставок, их уширение могут привести к ослаблению описанных эффектов размерного квантования легких и тяжелых дырок в наногетероструктурах, а образование дефектов — к снижению интенсивности ФЛ.

Глава 5. Спектроскопия фотолюминесценции метаморфных модулированнолегированных гетероструктур  $In_xGa_{1-x}As/In_vAl_{1-v}As$ 

Метаморфные МЛГ InGaAs/InAlAs, выращенные на подложках GaAs, являются одними из самых перспективных структур для полевых НЕМТ транзисторов. Они успешно конкурируют с НЕМТ наногетероструктурами на подложках InP, благодаря бо́льшим размерам и механической прочности, а также низкой цене подложек GaAs. С использованием МБ на подложках GaAs возможно выращивать наногетероструктуры  $In_xAl_{1-x}As/In_xGa_{1-x}As$  с заданным высоким содержанием x > 0.3 индия In в активной области.

При исследовании МЛГ на подложках GaAs и InP оптические исследования дополняют электрофизические измерения основных параметров HEMT гетероструктур – подвижности  $\mu_e$  и концентрации  $n_S$  двумерного электронного газа. Они позволяет характеризовать энергетическое положение и заселенности электронных состояний в КЯ. Как следует из обзора литературы, широко обсуждалась возможность применения спектроскопии ФЛ для оценки двумерной концентрации электронов по форме и ширине полос люминесценции. Для МНЕМТ гетероструктур такие исследования практически не проводились. Применение спектроскопии ФЛ для исследования метаморфных МНЕМТ гетероструктур позволяет анализировать не только узкозонную область КЯ, но и широкозонную барьерную область метаморфного буфера. Высокая чувствительность ФЛ к энергетической структуре и дефектности гетероструктур позволяют успешно использовать метод для характеризации образцов с вариацией состава [111] либо упругих напряжений [ 235 ] в активной области, после технологических обработок образцов [236] и для оценки плотности прорастающих дислокаций [237].

Особенностью МНЕМТ гетероструктур, по сравнению с псевдоморфными изоморфными гетероструктурами, является сильная зависимость электрофизических параметров и структурного совершенства активной области от конструкции МБ и технологических режимов эпитаксиального роста ΜБ. К наиболее критическим технологическим режимам относятся температура роста метаморфного буфера, а также скорости роста эпитаксиальных слоев, составляющих МНЕМТ наногетероструктуру и соотношение потоков элементов III группы и молекул мышьяка As. В данной главе приведено исследование электрофизических параметров и особенностей спектров ФЛ МНЕМТ наногетероструктур  $In_xAl_{1-x}As/In_xGa_{1-x}As$  с содержанием индия  $x \sim 0.4$  и 0.7 в активной области.

# 5.1 Метаморфные HEMT-гетероструктуры $In_xGa_{1-x}As/In_xAl_{1-x}As$ на подложках GaAs с содержанием индия х $\approx 0.7$ в квантовой яме

### 5.1.1 Структура и условия получения образцов

В качестве подложек GaAs использовались нелегированные полуизолирующие подложки GaAs с ориентацией (100)  $\pm$  0.5° Wafer Technology Ltd. Удельное сопротивление подложек  $-6\cdot10^7$  Ом·см, плотность дислокаций не более  $2\cdot10^3$  см<sup>-2</sup>. Образцы 895 и 901 выращены на разориентированных подложках GaAs (1 0 0) на  $2\pm0.5^\circ$  в направлении [0 -1 -1]. Эта подложка была изготовлена фирмой AXT; ее удельное сопротивление  $6\cdot10^8$  Ом·см.

МНЕМТ гетероструктуры включали одностороне  $\delta$ -легированную кремнием КЯ  $In_{0.7}Al_{0.3}As/In_{0.7}Ga_{0.3}As/In_{0.7}Al_{0.3}As$  толщиной 17 нм. Схема образцов приведена в таблице 5.1. Образцы обладали одинаковой активной областью, включающей в себя КЯ и ограничивающие барьерные слои, но имели разную толщину  $h_{\rm ME}$  и конструкцию метаморфного буфера (МБ)  $In_xAl_{1-x}As$ . В образце 900 была увеличена плотность дельта-легирования.

Таблица 5.1 - Конструкция МНЕМТ гетероструктур с мольной долей индия  $x \approx 0.7$  в КЯ: толщина d и температура роста  $T_{\rm g}$  слоев

Слой	Состав	d, нм	T <sub>g</sub> , °C
Сар-слой	$i-In_{0.70}Ga_{0.30}As$	7	470°C
Барьер	$In_{0.70}Al_{0.30}As$	22	470°C
Легирование	$\delta$ -Si $(N_{\rm Si} = 2.5 \cdot 10^{12}  \rm cm^{-2})$	_	470°C
Спейсер	$In_{0.70}Al_{0.30}As$	6	470°C
Квантовая яма	$In_{0.70}Ga_{0.30}As$	17	470°C
Барьер	$In_{0.70}Al_{0.30}As$	46	470°C
Заглаживающий слой	$In_{0.70}Al_{0.30}As$	115	400°C
Инверсная ступень	$In_x Al_{1-x} As (x = 0.75 \rightarrow 0.70)$	50	400°C
Метаморфный буфер	$In_xAl_{1-x}As \ (x = 0.05 \rightarrow 0.75)$	$h_{ m MB}$	400°C
Сверхрешетка (СР1)	{AlGaAs/GaAs}×5	{2.0/1.5}	590°C
Буфер	GaAs	34	590°C
Подложка	GaAs	_	_

На подложке GaAs выращивался буферный слой GaAs для сглаживания ростовой поверхности и короткопериодная сверхрешетка CP1 {AlGaAs/GaAs} $\times$ 5 для препятствия сегрегации фоновых примесей с подложки в вышележащие слои. Затем начинался рост МБ. Конструкция МБ исследуемых образцов (пространственный профиль содержания In x по глубине) представлена на рисунке 5.2. Для образцов 830, 835, 842 и 888 был использован МБ  $In_xAl_{1-x}As$  с линейным профилем x. В образцах 830 и 835 в точках с текущим составом МБ x = 0.42 и 0.67 были введены две пятипериодные напряжённые сбалансировано-рассогласованные сверхрешётки CP2 { $In_{0.35}Ga_{0.65}As/In_{0.50}Al_{0.50}As$ } и CP3 { $In_{0.60}Ga_{0.40}As/In_{0.75}Al_{0.25}As$ }. В образце

888 число периодов в напряженных сверхрешётках СР2 и СР3 было увеличено до 30. Для образца 842 в МБ вводились инверсные ступени с перепадом содержания индия  $\Delta x = -0.02$  с последующими толстыми (100 нм) заглаживающими слоями в точках с текущим составом x = 0.22 и 0.46. Для образцов 889, 895 и 900 был использован МБ со ступенчатым профилем x; толщина каждой ступени - 70 нм, а повышение содержания Іп в ней –  $\Delta x = 0.05$  [238,239]. МБ всех исследованных образцов завершались инверсными ступенями. Максимальное содержание Іп в МБ составляет 0.75, которое в инверсной ступени линейно снижается до 0.7.

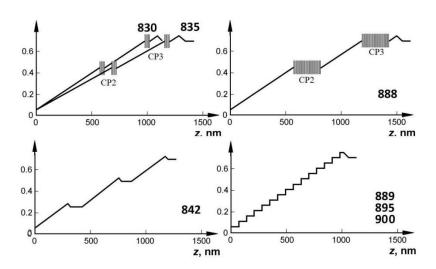


Рисунок 5.2 - Профиль содержания In x в МБ МНЕМТ гетероструктур с КЯ  $In_{0.70}Al_{0.30}As/In_{0.75}Ga_{0.25}As/In_{0.70}Al_{0.30}As$ 

Образцы выращивались при одинаковых условиях. Отношение потоков элементов V и III групп во время роста канала  $In_{0.7}Ga_{0.3}As$  составляло  $\gamma_1 = P_{As}/(P_{In} + P_{Ga}) \approx 30$ , а во время роста заглаживающего и барьерного слоёв  $In_{0.7}Al_{0.3}As$  составляло  $\gamma_2 = P_{As}/(P_{In} + P_{AI}) \approx 38$ .

В таблице 5.2 представлены измеренные с помощью эффекта Холла значения подвижностей  $\mu_{\rm e}$  и концентрации  $n_{\rm S}$  двумерного электронного газа в КЯ исследуемых образцов при температурах T=300 и 77 К, а также значения среднеквадратичной шероховатости поверхности  $R_q$ , измеренные методом атомно-силовой микроскопии. Поскольку активная область образцов была одинаковой (кроме образца 900), то наблюдающиеся отличия электрофизических параметров и морфологии поверхности связаны с влиянием конструкции МБ. Как видно, плотность ДЭГ в образцах существенно различается, несмотря на одинаковое легирование. Так, наибольшая концентрация электронов наблюдается в образцах 842 и 895. Стоит заметить, что в этих образцах наблюдается также наибольшая шероховатость поверхности. В МНЕМТ гетероструктурах рельеф поверхности повторяет шероховатости гетерограниц структуры [51]. Сложно представить механизм, по которому высокая шероховатость и непланарность гетерограниц приводит к увеличению плотности ДЭГ в КЯ.

Шероховатость МНЕМТ гетероструктур обычно определяется плотностью дислокаций в МБ [111]. В работе [56] было обнаружено, что в КЯ нелегированных МНЕМТ структур  $In_{0.75}Ga_{0.25}As/In_{0.75}Al_{0.25}As$  содержится ДЭГ плотностью порядка  $(1-3)\cdot 10^{11}$  см<sup>-2</sup>, которая зависит от дефектности буфера. Поэтому можно предположить, что увеличение плотности электронов в КЯ некоторых образцов связано с непреднамеренным легированием, связанным с образованием электрически активных дефектов в буфере, например, дислокаций. Значения подвижности электронов также коррелируют со среднеквадратичной шероховатостью поверхности образцов  $R_q$ . Наибольшие значения подвижности  $\mu_e$  при T=300 и 77 К наблюдаются в образцах 830 и 888, содержащих напряженные сверхрешетки в МБ, призванные блокировать прорастающие дислокации и не допускать их проникновение в активную область. Наихудшая подвижность  $\mu_e$  и морфология поверхности наблюдаются в образце 842 (с двумя дополнительными инверсными ступенями внутри МБ).

Таблица 5.2 — Электрофизические параметры (подвижность электронов  $\mu_{\rm e}$  и их двумерная концентрация  $n_{\rm S}$ ) и среднеквадратичная шероховатость поверхности  $R_q$  исследуемых образцов

No	$\mu_{\rm e},{\rm cm}^2/({\rm B\cdot c})$		$n_{\rm S},10^{12}{\rm cm}^{-2}$		P. vov
	300 K	77 K	300 K	77 K	$R_q$ , нм
830	12000	41200	1.57	1.45	7.2
835	10300	33900	1.32	1.26	7.9
842	6800	15000	2.1	1.84	13.8
888	12100	46900	1.7	1.56	8.2
889	9600	31600	1.75	1.53	6.0
895	11400	38700	2.16	2.11	10.6
900	12100	47600	2.93	2.94	5.8

## 5.1.2 Спектроскопия фотолюминесценции метаморфные гетероструктур $In_xGa_{1-x}As/In_xAl_{1-x}As$ с содержанием индия $x \approx 0.7$ в квантовой яме

На рисунке 5.3 представлены спектры ФЛ образца 889 (со ступенчатым МБ), измеренные при различных температурах от 87 К до 271 К в диапазоне энергий фотонов от 0.6 до 1.25 эВ [ 240 ]. Спектр содержит две полосы излучения: в области энергий фотонов  $0.6 < \hbar w < 0.78$  эВ — рекомбинация электронов и дырок в КЯ и в области  $0.8 < \hbar w < 1.1$  эВ — рекомбинация носителей заряда в буфере  $In_xAl_{1-x}As$ .

Полоса люминесценции в области 0.6-0.78 эВ присутствует в спектрах ФЛ во всем исследованном диапазоне температур. Красный сдвиг спектра при повышении T объясняется температурной зависимостью ширины запрещенной зоны  $In_{0.7}Ga_{0.3}As$ . Описываемая полоса ФЛ по форме и положению характерна для всех образцов. Она формируется в результате рекомбинации носителей в квантовой яме  $In_{0.7}Ga_{0.3}As/In_{0.7}Al_{0.3}As$ : двумерных электронов в двух

подзонах размерного квантования и фотовозбужденных дырок. Соответственно, спектр состоит из двух перекрывающихся пиков люминесценции e1-hh1 и e2-hh1, причем линия e2-hh1 гораздо более интенсивная. На рисунке 5.4 представлены спектры  $\Phi$ Л от КЯ всех исследованных образцов. В таблице 5.3 представлены энергии  $E_i$  соответствующих переходов, а также полуширина основного пика  $\Phi$ Л на половине амплитуды. Положение переходов e2-hh1 определялось по максимумам спектра, а e1-hh1 — по точка перегиба на низкоэнергетических хвостах. Разброс энергий переходов e1-hh1 и e2-hh1 между образцами не превышает 10 мэВ, что подтверждает идентичность состава и толщин слоев активных областей образцов

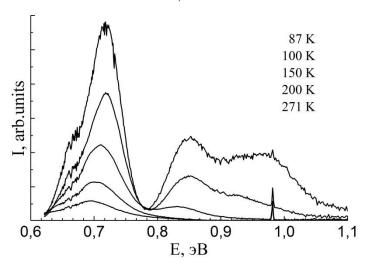


Рисунок 5.3 - Спектры ФЛ образца 889 в диапазоне температур 87 – 271 K

Таблица 5.3 – Значения энергии оптических переходов e1–hh1 и e2–hh1 и полуширины  $E, \ni B$  a1–hh1 a2–hh1 a2–hh1

№	E,	Δ, мэВ	
	e1-hh1	e2-hh1	e1- $hh1$
830	0.685	0.745	59
835	0.683	0.742	56
842	0,681	0.737	71
888	0.683	0.747	61
889	0,683	0.737	65
895	0,677	0,733	70
900	0,663	0,731	79

Как это описано в литературном обзоре, ролуширина пиков люминесценции МЛГ может коррелировать с концентрацией ДЭГ в КЯ. Уширение спектров от КЯ в этом случае объясняется энергетическим распределением двумерных электронов, которые при низких температурах занимают состояния с энергией от края первой подзоны размерного квантования  $E_1$  до уровня Ферми  $E_F$ . Концентрация двумерного электронного газа при низких температурах определяется формулой (1.6). Таким образом, концентрация электронов и ширина их

энергетического распределения могут быть связаны линейно. Однако это утверждение не проверялось для MHEMT гетероструктур с содержанием In x ~ 0.7.

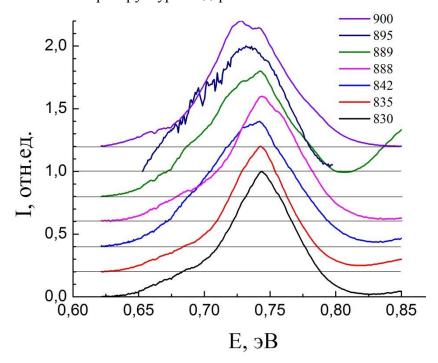


Рисунок 5.4 — Спектры ФЛ при 77 К от КЯ МНЕМТ гетероструктур InGaAs/InAlAs с содержанием In  $x \sim 0.7$ 

На рисунке 5.5 представлена связь между слоевой концентрацией  $n_S$  при  $T=77~{\rm K}$  и полушириной спектров  $\Phi \Pi$  при T = 77 K для исследованных образцов. Как видно, полуширина спектров увеличивается с ростом концентрации электронов аналогично псевдоморфным НЕМТ гетероструктурам. На рисунке 5.5 также проведена прямая линия, параметры которой определены методом наименьших квадратов. В пределах погрешности регистрации спектров ФЛ используемой установки экспериментальные точки хорошо ложатся на прямую. Отклонение по концентрации электронов составляет  $\pm 0.3 \cdot 10^{12}$  см<sup>-2</sup>. Некоторый разброс может быть связан с различной шероховатостью активной области образцов, а, значит, и степенью локализации дырок. Что, скорее всего, является неизбежным при сравнении гетероструктур с разными конструкциями МБ. Ha рисунке 5.6 представлена зависимость низкотемпературной подвижностью образцов и интенсивностью фотолюминесценции КЯ в максимуме. Наблюдаемая корреляция указывает на то, что центры рассеяния, структурные дефекты, которые приводят к существенному снижению подвижности в обр. 835, 842 и 889 являются и центрами безызлучательной рекомбинации или индуцируют образование центров безызлучательной рекомбинации вблизи активной области МНЕМТ гетероструктур во время эпитаксиального роста.

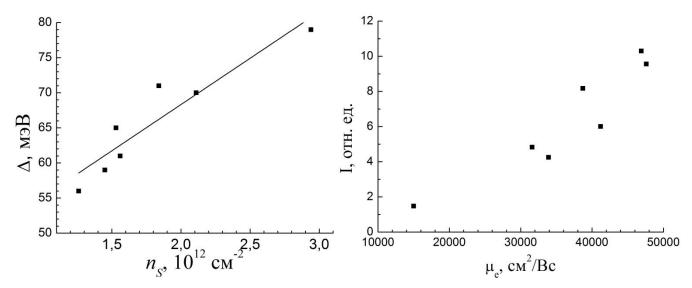


Рисунок 5.5 - Коррелляционная зависимость полуширины линии ФЛ КЯ от концентрации ДЭГ  $n_{\rm S}$ 

Рисунок 5.6 - Коррелляционная зависимость интенсивности линии ФЛ КЯ  $In_{0.7}Ga_{0.3}As/In_{0.7}Al_{0.3}As \ при \ T=77 \ {\rm K} \ {\rm or} \ \mu_{\rm e}$ 

Рассмотрим спектры ФЛ в диапазоне энергий фотонов от 0.8 до 1.25 эВ. Этот диапазон соответствует рекомбинации носителей заряда в заглаживающих и барьерных слоях  $In_{0.7}Al_{0.3}As$ , а также в верхней части метаморфного буфера InAlAs. Представленные на рисунке 5.7~a спектры ФЛ можно разделить на три типа по характерным особенностям в этом диапазоне энергий. К первому типу относятся спектры ФЛ образцов 830, 835 и 888, т. е. образцов, содержащих сверхрешётки внутри линейного МБ. Ко второму типу относится спектр ФЛ образца 842 с двумя дополнительными инверсными ступенями внутри линейного МБ. К третьему типу относится спектр ФЛ образца 889 со ступенчатым МБ. Заметим, что на всех спектрах наблюдается узкий пик при  $\hbar w = 0.977$  эВ, соответствующий второму порядку дифракции лазерной линии в монохроматоре. Особенности спектров ФЛ связаны с различием конструкции МБ в исследуемых образцах и с вызванным этим разным распределением индия в заглаживающих и нижних барьерных слоях.

Полосы в спектрах ФЛ всех образцов в описываемом диапазоне очень широкие и, очевидно, состоят из нескольких компонент. На рисунке 5.7  $\delta$  представлен результат математического разложения экспериментальных спектров ФЛ на гауссовы функции, а в таблице 5.4 — энергетическое положение соответствующих пиков и их полуширины. Если предположить, что каждый пик является результатом рекомбинации электронов и дырок в какой-либо части метаморфного буфера или барьерных слоев с определенным составом  $In_xAl_{1-x}As$ , то по известной зависимости ширины запрещенной зоны твердого раствора  $E_g$  ( $In_xAl_{1-x}As$ ) от состава можно оценить содержание индия In в соответствующих слоях. Результаты данной оценки также приведены в таблице 5.4.

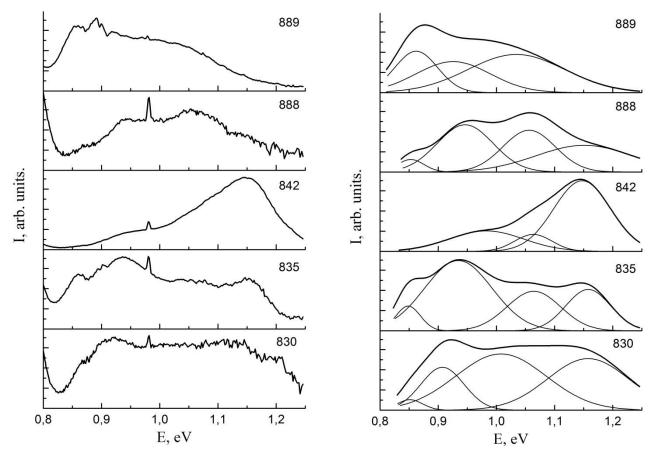


Рисунок 5.7 - Спектры фотолюминесценции InAlAs барьерных областей исследуемых *МНЕМТ* гетероструктур при  $T=77~{\rm K}$  в диапазоне энергий  $0.8-1.3~{\rm эB}$ : a-измеренные спектры  $\Phi \Pi,\, \delta-$  результат разложения на гауссианы

Таблица 5.4 — Энергетическое положение пиков ФЛ МБ, их полуширины и соответствующие составы твердого раствора  $In_xAl_{1-x}As$ .

№	$E_{max}$ , эВ	$\Delta E$ , $\partial B$	x
	0.851	0.051	0.79
920	0.907	0.087	0.77
830	1.008	0.183	0.72
	1.158	0.165	0.66
	0.848	0.050	0.79
835	0.935	0.137	0.75
833	1.064	0.109	0.70
	1.158	0.091	0.66
	0.983	0.151	0.73
842	1.063	0.076	0.70
	1.147	0.115	0.66
	0.853	0.053	0.79
888	0.946	0.113	0.75
000	1.056	0.106	0.70
	1.151	0.196	0.66
	0.862	0.087	0.79
889	0.926	0.150	0.76
	1.034	0.196	0.71

В спектрах ФЛ образцов в диапазоне энергий фотонов 0.8-1.2 эВ присутствует широкая полоса люминесценции, которая является результатом наложения спектров от различных областей верхней части метаморфного буфера и барьерного слоя, которые состоят из твердого раствора  $In_xAl_{1-x}As$  с различной мольной долей индия. Во всех спектрах  $\Phi \Pi$  присутствуют полосы люминесценции, соответствующие твердому раствору  $In_xAl_{1-x}As$  с  $x \sim 0.7$ . соответствует верхней части барьерной области гетероструктуры, которая выращивалась при повышенной температуре 470 °C. Заглаживающий слой  $In_xAl_{1-x}As$  выращивался при тех же значениях молекулярных потоков индия, алюминия и мышьяка, что и верхний барьерный слой, но при пониженной температуре подложки 400 °С. Поэтому содержание  $\ln x$  в этом слое должно быть немного выше 0.7, а пик ФЛ от него смещен в сторону меньших энергий. Пики ФЛ, соответствующие, согласно таблице 5.4, составу  $In_xAl_{1-x}As = 0.75 - 0.79$  возникают в результате рекомбинации носителей в инверсной ступени. В данной области МБ максимальное расчетное содержание In равно 0.75. Наблюдаемое смещение пика ФЛ в сторону меньших энергий можно объяснить явлением сегрегации индия, который имеет тенденцию накапливаться на поверхности в процессе эпитаксиального роста. Метаморфный буфер представляет собой довольно толстый слой InAlAs переменного состава, поэтому в вершине МБ – инверсной ступени содержание Іп может превысить расчетное. Изменение ширины запрещенной зоны полупроводников под действием упругих напряжений также может вызвать смещение пиков. Для образцов 830, 835 и 888 может наблюдаться люминесценция от состояний верхней напряженной сверхрешетки SL3 с составом  $\{In_{0.60}Ga_{0.40}As/In_{0.75}Al_{0.25}As\}$ , которая должна наблюдаться где-то в области от  $0.73 \ \mathrm{эB}$  (ширина запрещенной зоны  $\mathrm{In}_{0.60}\mathrm{Ga}_{0.40}\mathrm{As}$ ) до 0.95 эВ ( $In_{0.75}Al_{0.25}As$ ). К сожалению, большая полуширина пиков ФЛ на рисунке 5.7 не позволяет точно идентифицировать область, в которой они возникли, а само разбитие на гауссовы пики является условным.

Как видно из таблицы 5.4, максимальное содержание In, определенное по спектрам ФЛ, наблюдается в образце 889 со ступенчатым метаморфным буфером. Спектр ФЛ этого образца отличается от других образцов тем, что самый интенсивный пик от барьерной области для него располагается в диапазоне энергий 0.8 – 1.0 эВ. Данная особенность спектра ФЛ связана с двумя причинами. Во-первых, образец 889 является единственным образцом, содержащим в своем МБ ступень толщиной 30 нм с расчетным содержанием In 0.75. Во всех остальных образцах пространственный профиль содержания In является линейным, а мольная доля In достигает 0.75 только в узкой области (существенно меньше 30 нм) в вершине инверсной ступени. Во-вторых, при резком ступенчатом изменении содержания индия при МЛЭ может более заметно проявляться «эффект бани», который представляет собой всплеск потока индия из молекулярного источника сразу после открытия заслонки вследствия изменения

температурного режима. Во время МЛЭ на границе между ступенями метаморфного буфера эпитаксиальный рост прерывался для того, чтобы произвести изменение температуры индиевой ячейки. При росте ступенчатого МБ повышение содержания In происходит более резко и шаг изменения температуры индиевой ячейки больше, чем в случае линейного МБ. Таким образом, для образца 889 более вероятны условия для повышенного содержания In в эпитаксиальных слоях.

На рисунке 5.3 приведена также температурная эволюция спектров ФЛ образца 889 в диапазоне от 77 К до комнатной температуры. При увеличении температуры спектр смещается в красную сторону, в соответствии с температурной зависимостью ширины запрещенной зоны полупроводников. При *Т* выше 150 К в спектрах исчезает высокоэнергетическая полоса 0.9 – 1.1 эВ люминесценции от барьерной области, а остается только люминесценция от КЯ и пик в диапазоне 0.8 - 0.9 эВ. По-видимому, носители заряда при этой температуре до рекомбинации успевают продиффундировать в самую узкозонную часть метамофрного буфера — инверсную ступень, либо в квантовую яму. При комнатной температуре наблюдается только рекомбинация носителей в КЯ, а пик от барьера и МБ отсутствует.

Заметим, что похожие широкие спектры  $\Phi$ Л от слоев InAlAs наблюдались в работах [47, 140,241]. Авторы объясняют особенности в спектрах  $\Phi$ Л неоднородностью состава тройного соединения InAlAs, которая вызывается образованием кластеров In-As и Al-As и неидеальным внедрением катионов Al. Этот эффект ведёт, во-первых, к пространственному изменению ширины запрещённой зоны, во-вторых, к образованию локальных внутренних напряжений. Оба этих эффекта приводят к сдвигам и уширениям спектров  $\Phi$ Л от слоев InAlAs. Исходя из этого можно утверждать, что наблюдаемые особенности в спектрах  $\Phi$ Л для диапазона энергий фотонов 0.82-1.25 эВ, наблюдающиеся в наших образцах, связаны с изменением состава слоя  $In_xAl_{1-x}As$ . И это изменение состава зависит от конструкции метаморфного буфера.

# 5.2 Метаморфные HEMT-гетероструктуры $In_xGa_{1-x}As/In_xAl_{1-x}As$ на подложках GaAs с содержанием индия $x\approx 0.4$ в квантовой яме

### 5.2.1 Структура и условия получения образцов

Односторонне  $\delta$ -легированные кремнием МНЕМТ наногетероструктуры содержали КЯ  $In_{0.38}Al_{0.62}As/In_{0.37}Ga_{0.63}As/In_{0.38}Al_{0.62}As$  толщиной 22 нм и отличались конструкцией метаморфного буфера и толщиной верхнего сильно-легированного cap-слоя ( $N_{\rm Si}=6\cdot10^{18}~{\rm cm}^{-3}$ ). В таблице 5.5 представлено строение исследуемых образцов с указанием толщин и температуры роста слоев. Для обр. 821, 822, 838 и 841 толщина cap-слоя составляла 12 нм, а для обр. 844 и 849 – 16 нм.

Таблица 5.5 - Конструкция МНЕМТ наногетероструктур с мольной долей индия  $x \approx 0.4$  в КЯ, толщина d слоев и температура роста  $T_g$ .

Слой	Состав	d, нм	$T_g$ , °C
Сар-слой	$n^+$ -In <sub>0.37</sub> Ga <sub>0.63</sub> As	12 или 16	500
Барьер	$In_{0.38}Al_{0.62}As$	20	500
Легирование	$\delta$ -Si (8.1·10 <sup>12</sup> cm <sup>-2</sup> )	_	500
Спейсер	$In_{0.38}Al_{0.62}As$	6.7	500
Квантовая яма	$In_{0.37}Ga_{0.63}As$	22	500
Барьер	$In_{0.38}Al_{0.62}As$	185	500
Заглаживающий слой	$In_{0.38}Al_{0.62}As$	95	400
Инверсная ступень	$In_{0.42}Al_{0.58}As \rightarrow In_{0.38}Al_{0.62}As$	90	400
Метаморфный буфер	$In_xAl_{1-x}As \ (x = 0.05 \rightarrow 0.42)$	1200	400
Сверхрешетка	{AlGaAs/GaAs}×5	19	590
Буфер	GaAs	34	590
Подложка	GaAs	_	_

На подложке GaAs выращивался тонкий (34 нм) буферный слой GaAs, а затем пятипериодная сверхрешетка AlGaAs/GaAs. Затем выращивался МБ  $In_xAl_{1-x}As$  толщиной 1200 нм с линейным изменением x от 0.05 до 0.42 со следующими за ним инверсной ступенью  $In_{0.42}Al_{0.58}As \rightarrow In_{0.38}Al_{0.62}As$  (90 нм) и заглаживающим слоем  $In_{0.38}Al_{0.62}As$  (95 нм).

Особенность конструкции МБ образца 838 заключалась в том, что в МБ образца были вставлены две пятипериодные напряженные сверхрешетки  $\{In_{0.27}AI_{0.73}As/In_{0.18}Ga_{0.82}As\} \times 5$  и  $\{In_{0.41}AI_{0.59}As/In_{0.31}Ga_{0.69}As\} \times 5$  на расстоянии от подложки 530 и 990 нм, соответственно, симметрично рассогласованные на  $\Delta x = 0.05$  относительно текущего состава МБ в данных точках глубины. При выращивании 841 образца была использована 10-периодная сверхрешетка GaAs/AlGaAs вместо 5-периодной для остальных образцов.

Температуры роста эпитаксиальных слоев и молекулярные потоки In, Ga и Al во время МЛЭ сохранялись одинаковыми для всех образцов, использовались только различные парциальные давления мышьяка (таблица 5.6). Рост гетероструктур начинался при одинаковых значениях парциальных давлений Al, Ga и In. Поскольку время роста метаморфных структур довольно велико (порядка 4 часов), то давления молекулярных потоков элементов III группы проверялось в начале и в конце рабочего дня после проведения ростовых процессов. Для некоторых образцов отмечался уход значений давлений Al, Ga, In, As.

Исследование морфологии образцов проводилось методами АСМ и растровой электронной микроскопии. На поверхности образцов 821, 838, 844 и 849 были обнаружены дефекты. Они представляют собой складчатые возвышенности прямоугольной формы, ориентированные строго по кристаллографическим направлениям [0 1 1] и [0 -1 1], их характерные размеры составляют 1.5-2.0 мкм и одинаковы для всех образцов, в которых они наблюдаются, но плотность дефектов  $\rho$  изменяется от образца к образцу. По-видимому, они

образовались в результате выхода вдоль определенных кристаллографических направлений на поверхность образца сгруппировавшихся дефектов упаковки. На поверхности обр. 841 видны ориентированные вдоль <0 1 1> бороздки длиной до 1 мкм и шириной ~ 0.1 мкм, представляющие собой выходы на поверхность одиночных дефектов упаковки. Поверхность образца 822 лишена дефектов и демонстрирует характерный для метаморфных гетероструктур волнообразный поперечно-полосатый рельеф (cross-hatch) [51, 138].

Таблица 5.6 - Давление мышьяка при МЛЭ росте, электрофизические параметры, среднеквадратичная шероховатось поверхности  $R_q$  по площади  $20 \times 20 \, {\rm мкm}^2$  и плотность дефектов  $\rho$  на поверхности МНЕМТ наногетероструктур с мольной долей индия  $x \approx 0.4$  в КЯ

№	$P_{\rm As}, 10^{-6}$	$\mu_{\rm e}$ , cm <sup>2</sup> ·(B·c) <sup>-1</sup>		$n_{\rm S},10^{12}{\rm cm}^{-2}$		$R_q$ ,	$\rho$ , $10^5  \text{cm}^{-2}$
145	торр	300 K	77 K	300 K	77 K	HM	
821	5.2	6800	19800	3.54	3.19	4.5	5
822	5.4	7100	20200	3.24	2.96	4.7	0
849	5.4-6.0	4100	11000	5.5	4.00	7.4	45
841	7.8-8.0	6000	15500	3.33	2.80	4.2	86
844	8.1	5500	14700	5.12	3.86	4.0	1
838	8.2	4700	11100	3.23	2.98	21	150

Электрофизические параметры исследованных образцов (холловская подвижность  $\mu_e$  и концентрация  $n_{\rm S}$ ) при температурах 300 и 77 K, а также измеренные с помощью АСМ величины среднеквадратичной шероховатости поверхности  $R_{\rm q}$  по площади 20 х 20 мкм² приведены в таблице 5.6 [242]. В образцах 849 и 844 с увеличенной толщиной  $n^+$  контактной области двумерная холловская концентрация электронов существенно выше, чем в остальных исследованных образцах, а подвижность существенно ниже. К тому же,  $n_{\rm S}$  в образцах 849 и 844 существенно уменьшается при снижении температуры, что не характерно для вырожденного двумерного электронного газа в КЯ. В этих образцах, очевидно, наблюдается параллельная проводимость по  $n^+$ -In<sub>0.38</sub>Ga<sub>0.62</sub>As слою, а снижение двумерной концентрации носителей при азотной температуре объясняется вымораживанием электронов  $n^+$ -слоя на мелкие примесные состояния атомов кремния.

Приведенные электрофизические параметры не удаётся однозначно соотнести со значением  $P_{\rm As}$  во время МЛЭ роста. Гораздо лучшее соответствие прослеживается между подвижностью  $\mu_{\rm e}$  и такими параметрами морфологии поверхности, как плотность дефектов  $\rho$  на поверхности и связанная с ней среднеквадратичная шероховатость  $R_q$ :  $\mu_{\rm e}$  уменьшается при увеличении плотности квадратных дефектов и шероховатости, особенно это заметно при температуре T=77 К. Это объясняется рассеянием ДЭГ на прорастающих дислокациях и дефектах упаковки в активной области гетероструктуры. Таким образом, помимо релаксации

упругих напряжений при аккомодации параметров решетки подложки и активных слоев гетероструктуры, важной функцией метаморфного буфера является предотвращение проникновения дислокаций в активную область, что может неблагоприятно повлиять на электрофизические характеристики структур.

# 5.2.2 Спектроскопия фотолюминесценции метаморфных HEMT-гетероструктур $In_xGa_{1-x}As/In_xAl_{1-x}As$ на подложках GaAs с содержанием индия $x \approx 0.4$

На рисунке 5.8 представлены результаты численного расчета зонной структуры и волновых функций электронов в КЯ  $In_{0.38}Ga_{0.62}As/In_{0.38}Al_{0.62}As$ . Электроны  $n^+$ -слоя экранируют поверхностный потенциал  $In_{0.38}Ga_{0.62}As$  полупроводника. Поэтому для обоих типов гетероструктур с толщиной  $n^+$  области 12 и 16 нм электронные состояния в первой и второй подзоне размерного квантования ямы  $In_{0.38}Ga_{0.62}As/In_{0.38}Al_{0.62}As$ , т.е. ВФ и положение уровней энергии относительно уровня Ферми, практически совпадают.

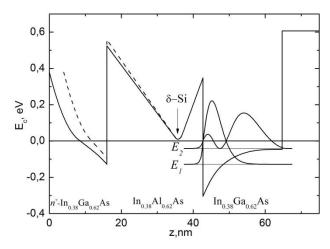


Рисунок 5.8 — Рассчитанные пространственные профили зоны проводимости  $E_{\rm C}$  и квадратов электронных волновых функций  $\Psi_i^2$ , а также уровни размерного квантования  $E_i$  в КЯ  ${\rm In}_{0.38}{\rm Ga}_{0.62}{\rm As/In}_{0.38}{\rm Al}_{0.62}{\rm As}$  с различной толщиной  $n^+$ -слоя: 16 нм (сплошная) и 12 нм (пунктир).

Согласно расчету, двумерная концентрация электронов в яме  $3.2 \cdot 10^{12}$  см<sup>-2</sup>, при этом заполнены две подзоны размерного квантования, поэтому в спектрах ФЛ, аналогично псевдоморфным InGaAs HEMT гетероструктурам, можно ожидать две линии излучения 1e-1h и 2e-1h, расстояние между которыми определяется разностью энергий подзон размерного квантования и составляет 75 мэВ. Однако ВФ электронов первой подзоны сильно локализована вблизи верхней гетерограницы КЯ вследствие притяжения положительно заряженных доноров δ-слоя. Она слабо перекрывается с дырочной ВФ. Дырки, напротив, локализуются вблизи нижней гетерограницы КЯ. Электронная ВФ второй подзоны локализована значительно слабее и распространяется на всю область КЯ. Вследствие пространственного разделения носителей

интенсивность полосы ФЛ 2e-1h, соответствующей рекомбинации электронов второй подзоны КЯ и дырок, может превзойти интенсивность перехода 1e-1h, несмотря на различающуюся заселенность первой и второй электронных подзон.

Большая часть линейного МБ исследованных гетероструктур  $In_{0.38}Al_{0.62}As/In_{0.38}Ga_{0.62}As$  прозрачна для света гелий-неонового лазера (1.96 эВ) (рисунок 5.9). Лазерное излучение поглощается в тонкой активной области гетероструктуры — КЯ и окружающих барьерах, а также в заглаживающем и барьерном слое InAlAs, инверсной ступени и верхней части МБ, мольная доля индия в которой выше x > 0.36. Основная часть метаморфного буфера с x < 0.36 толщиной порядка 1 мкм имеет ширину запрещенной зоны больше энергии фотона лазера, поэтому возбуждающее излучение, в отличие от псевдоморфных НЕМТ гетероструктур, достигало подложки GaAs.

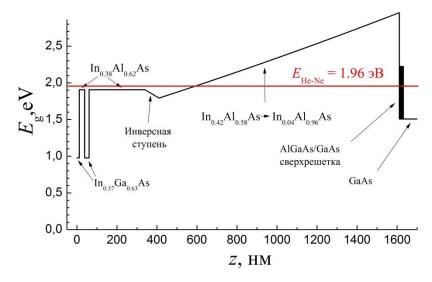


Рисунок 5.9 -Профиль ширины запрещенной зоны в МНЕМТ-гетероструктурах  $In_xGa_{1-x}As/In_xAl_{1-x}As$  в сравнении с энергией квантов He-Ne лазера (1.96 эВ)

На рисунке 5.10 представлен спектр фотолюминесценции при  $T=77~\rm K$  одного из исследованных образцов (841) [ 243 ]. В спектре присутствуют четыре линии излучения, соответствующие рекомбинации носителей заряда в КЯ, барьерной области InAlAs, подложке GaAs и короткопериодной сверхрешетке GaAs/AlGaAs. Особенность конструкции 841 образца заключается в увеличенной толщине GaAs/AlGaAs сверхрешетки (10 периодов по 3.8 нм) по сравнению с остальными исследованными образцами, в спектрах  $\Phi$ Л которых наблюдались только 3 линии излучения и отсутствовала полоса  $\Phi$ Л сверхрешетки GaAs/AlGaAs.

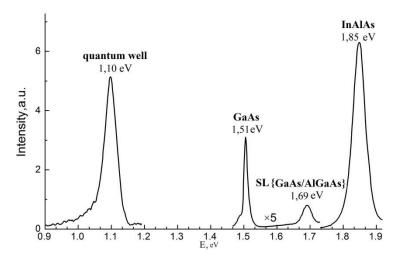


Рисунок 5.10 – Спектр ФЛ образца 841 с указанием областей наногетероструктуры, в которых происходит рекомбинация носителей заряда, и соответствующих энергий переходов

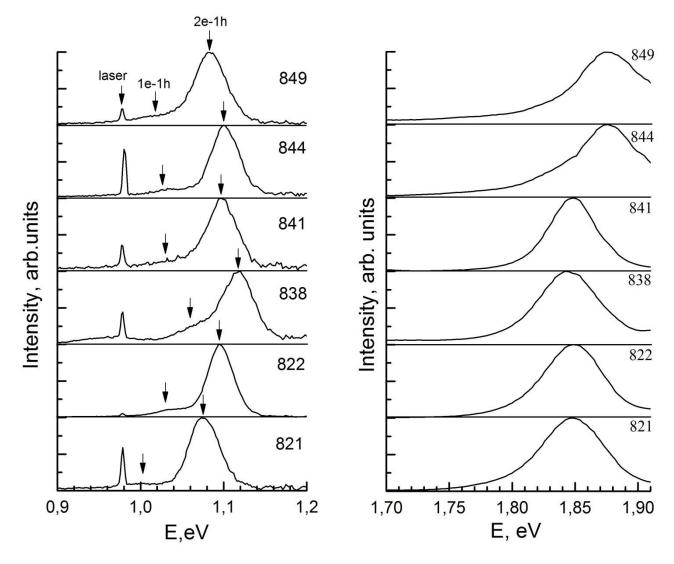


Рисунок 5.11 - Спектры ФЛ МНЕМТ-гетероструктур  $In_{0.38}Al_{0.62}As/In_{0.38}Ga_{0.62}As$  в различных диапазонах энергий: а) излучение КЯ, б) излучение барьеров  $In_xAl_{1-x}As$ .

На рисунке 5.11 a представлены спектры фотолюминесценции исследованных образцов в диапазоне энергий фотонов  $\hbar\omega$  от 1.0 до 1.18 эВ, соответствующему рекомбинации носителей заряда, расположенных в КЯ  $In_{0.38}Ga_{0.62}As$ . Как видно из таблицы 5.7, положение  $E_{max}$  изменяется от значения 1.076 эВ для образца 821 до 1.115 эВ (обр. 838).

В сторону меньших на 65 мэВ энергий от основного пика наблюдается слабая и широкая полоса люминесценции, которая наиболее отчетливо проявляется для 838 и 822 обр. В работе [ 244 ] были измерены спектры ФЛ односторонне легированных метаморфных НЕМТ гетероструктур с различной шириной квантовой ямы. При малой ширине КЯ в спектрах ФЛ присутствовали линии излучения от двух подзон размерного квантования, а при увеличении толщины ямы интенсивность полосы 1e-1h по сравнению с 2e-1h снижалась, при толщине КЯ >20 нм пик ФЛ 1e-1h превратился в слабое плечо, а при толщине КЯ 40 нм он полностью исчез. Аналогично, наблюдаемые в данной работе основные пики ФЛ мы приписываем рекомбинации носителей заряда 2e-1h, а более слабое из-за пространственного разделения электронов и дырок плечо при меньших энергиях — переходам 1e-1h.

Таблица 5.7 - Энергетическое положение пиков фотолюминесценции и значения ширины пиков на полувысоте  $\Delta$ 

M.	Квантовая яма		Барьер	
$N_{ m o 6p}$	ћω, эВ	$\Delta$ , $\ni$ B	ћω, эВ	Δ, эΒ
821	1.076	0.042	1.848	0.065
822	1.096	0.038	1.846	0.060
849	1.083	0.048	1.878	0.070
841	1.097	0.044	1.849	0.048
844	1.101	0.040	1.875	0.072
838	1.115	0.050	1.845	0.059

Как видно из результатов, представленных в таблице 5.7 и из рисунка 5.11 a, наблюдается разброс положений пиков ФЛ от КЯ, который достигает значения 0.039 эВ. Наблюдаемый разброс не может быть объяснен погрешностью и случайной ошибкой измерения спектров. Также его нельзя связать с различиями плотности электронов в МЛГ, поскольку эти различия обусловлены  $n^+$ -слоем. Если допустить, что смещение пиков определяется только вариацией ширины запрещенной зоны  $In_xGa_{1-x}As$  за счет изменения мольной доли индия в КЯ (и пренебречь сложной самосогласованной энергетической структурой состояний в КЯ), то получается значение x порядка 3%. Технологические режимы роста активных слоев исследуемых структур, а именно: температура подложки во время формирования активных слоев, парциальные давления  $P_{Al}$ ,  $P_{Ga}$ ,  $P_{In}$  поддерживались постоянными и одинаковыми для всех образцов, насколько позволяла точность эпитаксиальной установки. Перед началом каждого процесса роста  $P_{Al}$ ,  $P_{Ga}$ ,  $P_{In}$  и  $P_{As}$  выставлялись одинаковыми для всех образцов. Также

выдерживалось одинаковым время для стабилизации молекулярных потоков для заданной рабочей температуры. Активная область гетероструктуры выращивается в самом конце после очень толстого МБ, поэтому за время роста возможен уход парциальных давлений In, Ga, Al и, особенно, As. Для оценки возможного отклонения парциальных давлений молекулярных источников, проводились контрольные измерения давлений после каждого процесса роста. Максимальный разброс давлений галлия  $P_{\rm Ga}$  по образцам составлял ~2%, для индия  $P_{\rm In}$  ~7%, для алюминия  $P_{\rm Al}$  ~ 4%. Наименьшее значение  $P_{\rm In}$  после роста оказалось для обр. 838, а наибольшие значения для обр. 821 и 849. В результате обнаруженной нестабильности молекулярного потока In изменяется не только состав  ${\rm In}_x{\rm Ga}_{1-x}{\rm As}$  КЯ, но изменяется ширина КЯ, а также толщина спейсера, что также может привести к изменению положения основного пика ФЛ. Эти данные показывают, что спектроскопия ФЛ является очень чувствительным и информативным методом МНЕМТ гетероструктур. Она оказывается очень полезным неразрушающим методом при отработке и оптимизации технологических режимов роста новых полупроводниковых структур. Как видно из представленных данных, ФЛ крайне чувствительна даже к малым изменениям технологических режимов роста.

На рисунке 5.11 б представлены спектры ФЛ, измеренные при 77 К для диапазона энергий фотонов от 1.7 до 1.92 эВ. К сожалению, энергии фотонов лазера было достаточно только для возбуждения люминесценции в самом узкозонном слое МБ – инверсной ступени с максимальной мольной долей индия  $In_{0.42}Al_{0.58}As$  и окружающих ее барьерной области  $In_{0.38}Al_{0.62}As$ , заглаживающеего слоя  $In_{0.38}Al_{0.62}As$ , который выращивается при пониженной температуре. Если бы энергия фотонов лазера была больше, то на спектрах ФЛ МБ можно было бы наблюдать многокомпонентную структуру, аналогичную спектрам MHEMT с x = 0.7. Но в данном случае наблюдается один широкий пик без тонкой структуры с полушириной ~0.07 эВ, который позволяет оценить средний состав твердого раствора  $In_xAl_{1-x}As$  по концентрационной зависимости оптической ширины запрещенной зоны. Это дает  $x \sim 0.4$  для обр. 821, 822, 838 и 841, а для обр. 844 и 849  $x \sim 0.39$ . Как и в случае спектров от КЯ, разброс энергий пиков ФЛ в рассматриваемом диапазоне энергий фотонов мы объясняем отклонением молекулярных потоков In и Al от заданных значений во время эпитаксиального роста барьерного и заглаживающего слоев InAlAs. Так, значение  $P_{\rm Al}$  в конце процессов оказалось для образцов 844 и 849 больше, чем для других образцов. Это привело к сдвигу пика в спектрах ФЛ для этих образцов в сторону больших энергий.

#### Выводы

Таким образом, в спектрах ФЛ МНЕМТ структур с КЯ  $In_{0.7}Ga_{0.3}As/In_{0.7}Al_{0.3}As$  и  $In_{0.4}Ga_{0.6}As/In_{0.4}Al_{0.6}As$  наблюдаются две полосы излучения, соответствующие рекомбинации электронов и дырок в КЯ и в МБ  $In_xAl_{1-x}As$ . Полоса ФЛ от КЯ обычно состоит из двух перекрывающихся пиков e1-hh1 и e2-hh1, причем линия e2-hh1 гораздо более интенсивная. Это обусловлено асимметричностью потенциала КЯ, вызванной односторонним легированием структур. В МЛГ  $In_{0.7}Ga_{0.3}As/In_{0.7}Al_{0.3}As$  был обнаружен значительный разброс концентраций ДЭГ в КЯ, выращенных на МБ различных профилей, несмотря на одинаковые условия роста и дозу легирования. Этот разброс позволил обнаружить корреляционную зависимость между концентрацией электронов и полушириной линии ФЛ от КЯ.

Полосы люминесценции от МБ МНЕМТ структур могут состоять из нескольких компонент, которые соответствуют рекомбинации электронов и дырок в различных толстых слоях МБ  $In_xAl_{1-x}As$ , таких как отдельные слои ступенчатого МБ, инверсные ступени, заглаживающие слои  $In_{0.7}Al_{0.3}As$ , сверхрешетки. Форма спектров ФЛ от МБ изменяется от образца к образцу в зависимости от особенностей профиля химического состава в МБ. Каждая компонента спектра ФЛ МБ является результатом рекомбинации электронов и дырок в какойлибо части метаморфного буфера или барьерных слоев с определенным составом  $In_xAl_{1-x}As$ . Поэтому по известной зависимости ширины запрещенной зоны твердого раствора  $E_g$  ( $In_xAl_{1-x}As$ ) от состава можно оценить содержание индия In в соответствующих слоях МБ.

### Заключение

В проделанной экспериментальной и теоретической работе был исследован электронный спектр в МЛГ  $In_xGa_{1-x}As/InAlAs$  с различным содержанием индия In в KS (x=0.4-0.7), выращенных на подложках GaAs и InP. Основные результаты и выводы работы:

- 1. Проведен расчет электронного спектра и зонной структуры МЛГ  $In_xGa_{1-x}As/In_yAl_{1-y}As$  ( $x=0.53-0.7,\ y=0.4-0.52$ ) от геометрии гетероструктуры. Показано, что при отсутствии параллельной проводимости квантовые состояния электронов и дырок полностью определяются концентрацией ДЭГ  $n_S$ , толщиной КЯ и содержанием  $In\ x$  в КЯ. Построена номограмма зависимости энергий переходов e1-hh1 и e2-hh1 от концентрации ДЭГ  $n_S$  в КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  различной толщины.
- 2. Экспериментально исследованы структурные и электронные свойства МЛГ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  с центральными вставками InAs. Впервые обнаружен монотонный сдвиг в сторону меньших энергий максимума ФЛ от СКЯ при увеличении толщины вставки  $InAs\ L_{InAs}$ . Путем моделирования зонной структуры СКЯ показано, что смещение пика ФЛ при вариации  $L_{InAs}$  в основном происходит за счет изменения энергии подзоны hh1 при локализации тяжелых дырок внутри слоя InAs.
- 3. Впервые исследовано влияние парных вставок GaAs и InAs на спектры  $\Phi$ Л в МЛГ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ . С использованием расчетного моделирования предсказан инверсный порядок подзон легких и тяжелых дырок в КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ , содержащих слои GaAs. Предложен способ независимого управления состояниями (энергиями и В $\Phi$ ) тяжелых и легких дырок в КЯ  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  за счет создания потенциальных ям в валентной зоне для этих носителей напряженными вставками InAs (тяжелые дырки) и GaAs (легкие дырки).
- 4. В спектрах  $\Phi$ Л гетероструктур  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  на подложках InP обнаружена широкая и интенсивная полоса, связанная с рекомбинацией электронов и дырок вблизи гетерограницы. Положение и форма этой полосы  $\Phi$ Л зависит от температуры и длительности отжига подложки. Эти изменения были объяснены формированием потенциальной ямы для носителей заряда в переходном слое InAlAsP, образовавшемся в результате замещения атомов P в подложке InP атомами As при отжиге в потоке мышьяка.
- 5. Измерены спектры  $\Phi \Pi$  метаморфных гетероструктур  $In_xGa_{1-x}As/In_xAl_{1-x}As$  с содержанием индия в КЯ x=0.38 и x=0.7. Показано, что спектроскопия  $\Phi \Pi$  позволяет отслеживать изменения содержания In в КЯ  $In_xGa_{1-x}As$  для широкого диапазона изменения x. Обнаружена линейная зависимость полуширины пика  $\Phi \Pi$  КЯ  $In_{0.7}Ga_{0.3}As/In_{0.7}Al_{0.3}As$  от слоевой

концентрации электронов. Форма и положение полосы ФЛ от метаморфного буфера определяются профилем химического состава в нем.

Некоторые вопросы, возникшие в ходе исследования, остаются открытыми и требуют дальнейшего исследования. Так, результаты исследования влияния напряженных вставок GaAs и InAs на зонную структуру указывают на возможность независимого управления энергиями и ВФ тяжелых и легких дырок в КЯ InGaAs/InAlAs. Приведенные в диссертации модельные расчеты недостаточно точно описывают особенности дырочного спектра в структурах, содержащих напряженные вставки, поскольку в них отсутствует расчет продольного закона дисперсии дырок. Этот расчет может быть проведен в многозонном (кр)-приближении, учетывающем анизотропию эффективных масс дырок, непараболичность их закона дисперсии, а также вырождение состояний дырок в Г-точке зоны Бриллюэна. Это моделирование интересно и с точки зрения разработки активной области гетероструктур для приборов, работа которых основана на межзонных или межподзонных переходах с поглощением/испусканием фотонов: светодиодов, лазерных диодов, фотодетекторов, квантово-каскадных лазеров. Именно в таких приборах возможность управления дырочным спектром представляется наиболее перспективной. Интересным представляется и проведение экспериментальных исследований оптических спектров таких гетероструктур InGaAs/InAlAs со вставками InAs и GaAs. Как это известно из литературных данных, инверсный порядок подзон легких и тяжелых дырок в КЯ может привести к увеличению коэффициента поглощения при межподзонных оптических переходах. Подтверждение этой гипотезы для структур InGaAs/InAlAs, содержащих слои GaAs, позволило бы развить новые подходы к методике зонной инженерии состояний электронов и дырок в КЯ, основанной на применении упругих напряжений и функциональных слоев-вставок для модификации электронных свойств гетероструктур.

## Список сокращений и условных обозначений

ВФ – волновая функция;

ДГС – двойная гетероструктура;

ДЭГ – двумерный электронный газ;

ЗШУ – загрузочно-шлюзовое устройство установки эпитаксии «ЦНА-24»;

ИСВЧПЭ РАН – Институт сверхвысокочастотной полупроводниковой электроники Российской академии наук;

КЭХ – квантовый эффект Холла;

КЯ – квантовая яма;

МБ – метаморфный буфер;

МДП – металл-диэлектрик-полупроводник;

МЛГ – модулированно-легированная гетероструктура;

МЛЭ – молекулярно-лучевая эпитаксия;

ОПЗ – область пространственного заряда;

ПРЭМ – просвечивающая растровая электронная микроскопия;

ПЭМ – просвечивающая электронная микроскопия или просвечивающий электронный микроскоп;

CBY — сверхвысокочастотный диапазон электромагнитных волн с частотой от 100 М $\Gamma$ ц до 300  $\Gamma$  $\Gamma$ ц (длины волн 30 см — 1 мм);

СКЯ – составная квантовая яма, состоящая из нескольких полупроводниковых слоев;

ФЛ – фотолюминесценция;

ФЭУ – фотоэлектронный умножитель;

ЭДС – электродвижущая сила;

FWHM – full width at half maximum (полная ширина на половине амплитуды);

HEMT – high electron mobility transistor (транзистор с высокой подвижностью электронов), синоним MODFET - modulation doped field effect transistor (полевой транзистор с модулированным легированием);

LMHEMT – lattice matched HEMT (решеточно согласованный HEMT);

MHEMT – metamorphic HEMT (метаморфный HEMT);

PHEMT – pseudomorphic HEMT (псевдоморфный HEMT);

δ-легирование – способ легирования гетероструктур, при котором атомы примеси вводятся в тонкий, порядка 1 нм, слой полупроводника.

### Список литературы

- [1] Y. Yamashita. Pseudomorphic  $In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.7}Ga_{0.3}As$  HEMTs With an Ultrahigh  $f_T$  of 562 GHz / Y. Yamashita, A. Endoh, K. Shinohara, K. Hikosaka, T. Matsui, S. Hiyamizu, T. Mimura // IEEE Electron Device Letters. 2002. V. 23, N 10. P. 573.
- [2] Chang, E.-Y. InAs Thin-Channel High-Electron-Mobility Transistors with Very High Current-Gain Cutoff Frequency for Emerging Submillimeter-Wave Applications / E.-Y. Chang, C.-I Kuo, H.-T. Hsu, C.-Y. Chiang, Y. Miyamoto // Applied Physics Express. 2013. V. 6. P. 034001.
- [3] Alamo, J.A. del. Nanometre-scale electronics with III–V compound semiconductors / J.A. del Alamo // Nature. 2011. V. 479. P. 317–323.
- [4] Knap W. W. Knap, S. Rumyantsev, M.S. Vitiello, D. Coquillat, S. Blin, N. Dyakonova, M. Shur, F. Teppe1, A. Tredicucci, T. Nagatsuma. Nanotechnology, 24, 214002 (2013).
- [5] Stillman, W. J. Closing the Gap: Plasma Wave Electronic Terahertz Detectors / W. J. Stillman, M. S. Shur // J. Nanoelectron. Optoelectron. 2007. V. 2. P. 209–221.
- [6] Chang, L.L. Resonant tunneling in semiconductor double barriers / L.L. Chang, L. Esaki, R. Tsu // Appl. Phys. Lett. 1974. Vol. 24. P. 593.
- [7] Esaki, L. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors / L. Esaki, R. Tsu // IBM J. Res. Dev. 1970. V. 14. P. 61.
- [8] Dingle, R. Quantum states of confined carriers in very thin  $Al_xGa_{1-x}As$ -GaAs- $Al_xGa_{1-x}As$  heterostructures / R. Dingle, W. Wiegmann, C.H. Henry // Phys. Rev. Lett. 1974. Vol. 33. P. 827.
- [9] Tsui, D.C. Two-Dimensional Magnetotransport in the Extreme Quantum Limit / D.C. Tsui, H.L. Stormer, A.C. Gossard // Phys. Rev. Lett. 1982. Vol. 48. P. 1559.
- [10] Алферов, Ж.И. Двойные гетероструктуры: концепции и применения в физике, электронике и технологии (Нобелевская лекция) / Ж.И. Алферов // Успехи физических наук. 2002. Т. 72. №9. С. 1067.
- [11] Кульбачинский, В.А. Двумерные, одномерные и нульмерные структуры и сверхрешетки / В.А. Кульбачинский. М.: издательство НЭВЦ ФИПТ Физфака МГУ, 1998. 164 с.
- [12] Anderson, R. Experiments on Ge-GaAs heterojunctions / R. Anderson // Solid-State Electronics. 1962. Vol. 5. P. 341.
- [13] Schubert, E.F. Electron subband structure in selectively doped n-AlGaAs/GaAs heterostructures /
- E.F. Schubert, K. Ploog // IEEE Trans. on Electron Devices. 1985. Vol. ED-32. No. 9. P. 1868.
- [14] Херман, М. Полупроводниковые сверхрешетки: Пер. с англ. / М. Херман. М.: Мир, 1989. 240 с.

- [15] Ando, T. Electronic properties of two-dimensional systems / T. Ando, A.B. Fowler, F. Stern // Rev. Mod. Phys. 1982. Vol. 54. P. 437.
- [16] Bastard, G. Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures / G. Bastard. Wiley-Interscience, 1991. 357 p.
- [17] Dingle, R. Electron mobilities in modulation doped semiconductor heterojunction superlattices / R. Dingle, H.L. Störmer, A.C. Gossard, W. Wiegmann // Appl. Phys. Lett. 1978. Vol. 33. P. 665.
- [18] Schubert, E. F. Selectively Doped  $n-Al_xGa_{l-x}As/GaAs$  Heterostructures with High-Mobility Two-Dimensional Electron Gas for Field Effect Transistors / E. F. Schubert, K. Ploog // Appl. Phys. A. 1984. V. 33. P. 63-76.
- [19] Nguyen, L.D. Influence of Quantum-Well Width on Device Performance of AlGaAs/InGaAs (on GaAs) MODFET's / L.D. Nguyen, D.C. Rafulescu, M.C. Foisy, P.J. Tasker, L.F. Eastman // IEEE Trans. on Electron Devices. 1989. V. 36 (5). P. 833.
- [20] Brown, A. S. The impact of epitaxial layer design and quality on GaInAs/AlInAs high electron mobility transistor performance / A. S. Brown, U. K. Mishra, J. A. Henige, M. J. Delaney // Journal of Vacuum Science & Technology B. 1988. V. 6. P. 678.
- [21] Дубровский, В. Г. Теория формирования эпитаксиальных наноструктур / В. Г. Дубровский. М.: Физматлит, 2009. 352 с.
- [22] Andersson, T.G. Variation of the critical layer thickness with In content in strained In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As-GaAs quantum wells grown by molecular beam epitaxy / T. G. Andersson, Z. G. Chen, V. D. Kulakovskii, A. Uddin, J. T. Vallin // Applied Physics Letters. 1987. Vol. 51. P. 752.
- [23] Tacano, M. Critical layer thickness of a pseudomorphic InGaAs heterostructure grown on InP / M. Tacano, Y. Sugiyama, Y. Takeuchi // Applied Physics Letters. 1991. V. 58. P. 2420.
- [24] Matthews, J.W. Defects in epitaxial multilayers: I. Misfit dislocations / J.W. Matthews, A.E. Blakeslee // Journal of Crystal Growth. 1974. Vol. 27. P. 118.
- [25] Fritz, I. Dependence of critical layer thickness on strain for InGaAs/GaAs strained layer superlattices / I. Fritz, S. Picraux, L. Dawson, T. Drummond // Applied Physics Letters. 1985. Vol. 46. P. 967.
- [26] Gendry, M. Critical thicknesses of highly strained InGaAs layers grown on InP by molecular beam epitaxy / M. Gendry, V. Drouot, C. Santinelli, G. Hollinger // Applied Physics Letters. 1992. V. 60. P. 2249.
- [27] Pamulapati, J. The relation of the performance characteristics of pseudomorphic InGaAs/InAlAs modulation doped field effect transistors to molecular beam epitaxial growth modes / J. Pamulapati, R. Lai, G. I. Ng, Y. C. Chen, P. R. Berger // Journal of Applied Physics. 1990. V. 68. P. 347.

- [28] Tacano, M. Criticallayer thickness of a pseudomorphic InGaAs heterostructure grown on InP / M. Tacano, Y. Sugiyama, Y. Takeuchi // Applied Physics Letters. 1991. V. 58. P. 2420.
- [29] Yoshimi, Y. Pseudomorphic InAlAs/InGaAs HEMTs with an ultrahigh  $f_T$  of 562 GHz / Y. Yoshimi, E. Akira, K. Shinohara // IEEE El. Dev. Lett. -2002. V. 23. P. 573.
- [30] Wallart, X. High-mobility InGaAs/InAlAs pseudomorphic heterostructures on InP (001) / X. Wallart, B. Pinsard, F. Mollot // Journal of Applied Physics. 2005. V. 97. P. 053706.
- [31] W.T. Masselink. Real-space-transfer of electrons in InGaAs/InAlAs heterostructures / W.T. Masselink // Appl. Phys. Lett. 1995. V. 67. P. 801.
- [32] Hardtdegen H. Optimization of modulation doped GaInAs/InP heterostructures towards extremely high mobilities / H. Hardtdegen, R. Meyer, M. Hollfelder, Th. Schäpers, J. Appenzeller, H. LokenLarsen // Journal of Applied Physics. 1993. V. 73. P. 4489.
- [33] Akazaki, T. Improved InAlAs/InGaAs HEMT Characteristics by Inserting an InAs Layer into the InGaAs Channel / T. Akazaki, K. Arai, T. Enoki // IEEE Electron Dev. Lett. 1992. V. 13. P. 325.
- [ 34 ] Васильев, А.Л. Структурные и электрофизические свойства квантовых ям с наноразмерными вставками InAs в гетероструктурах на основе  $In_yAl_{1-y}As/In_xGa_{1-x}As$  на подложках InP / A. Л. Васильев, И. С. Васильевский, Г. Б. Галиев, Р. М. Имамов, Е. А. Климов, М. В. Ковальчук, Д. С. Пономарев // Кристаллография. 2011. Т. 56 (2). С. 324-335.
- [35] Akazaki, T. Improving the mobility of an In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As/ln<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As inverted modulation-doped structure by inserting a strained InAs quantum well / T. Akazaki, J. Nitta, H. Takayanagi // Appl. Phys. Lett. 1994. V. 65 (10). P. 1263-1265.
- [36] Nitta, J. Electron g-factor in a gated InAs-inserted –channel  $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  heterostructure / J. Nitta, Y. Lin, T. Koga, T. Akazaki // Phys. E. -2004. V. 20. P. 429–432.
- [37] Lin, Y. Electron g factor in a gated InGaAs channel with double InAs-inserted wells / Y. Lin, J. Nitta, T. Koga, T. Akazaki // Phys. E. 2004. V. 21. P. 656–660.
- [38] Hu, C. Evidence of the Coulomb gap observed in an InAs inserted In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As/In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As heterostructure / C. Hu, J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi // Phys. E. 2000. V. 7. P. 795-798.
- [39] Sexl, M. MBE growth of double-sided doped InA1As/InGaAs HEMTs with an InAs layer inserted in the channel / M. Sexl, G. Boehm, D. Xu, H. Heiss, S. Kraus, G. Traenkle, G. Weimann // J. Cryst. Growth. 1997. Vol. 175/176. P. 915–918.
- [40] Nitta, J. Transport properties in InAs-inserted channel  $In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As$  heterostructure coupled superconducting junction / J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi, K. Arai // Phys. Rev. B. 1992. V. 46. P. 14286-14290.

- [41] Richter, A. Transport properties of modulation-doped InAs-inserted-channel  $In_{0.75}Al_{0.25}As/In_{0.75}Ga_{0.25}As$  structures grown on GaAs substrates / A. Richter, M. Koch, T. Matsuyama, Ch. Heyn, U. Merkt // Appl. Phys. Lett. -2000. V. 77. P. 3227-3279.
- [42] Prasad, C. Electron–phonon interaction studies in an  $In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$  quantum well structure / C. Prasad, D.K. Ferry, D. Vasileska // Phys. E. -2003. V. 19. P. 215 220.
- [43] Požela, J. Electron mobility and subband population tuning by a phonon wall inserted in a semiconductor quantum well / J. Požela, A. Namajunas, K. Požela, V. Juciene // J. Appl. Phys. 1997. V. 81. P. 1775-1780.
- [44] Пожела, Ю. Рассеяния электронов на захваченных поверхностных оптических фононах в двухбарьерной гетероструктуре / Ю. Пожела, К. Пожела, В. Юцене // ФТП. 2007. Т. 41 (9). С. 1093-1098.
- [45] Бугаев, А.С. Полупроводниковые гетероструктуры InAlAs/InGaAs с метаморфным буфером InAlGaAs: конструкция, технология, применение / А.С. Бугаев, Г.Б. Галиев, П.П. Мальцев, С.С. Пушкарев, Ю.В. Федоров // Нано- и Микросистемная Техника. 2012. № 10 (147). С. 14.
- [46] Song Y. Effects of doping and grading slope on surface and structure of metamorphic InGaAs buffers on GaAs substrates / Y. Song, S. Wang, I. Tångring, Z. Lai, M. Sadeghi // Journal of Applied Physics. 2009. V. 106. P. 123531.
- [47] Shang, X.Z. Low temperature step-graded InAlAs/GaAs metamorphic buffer layers grown by molecular beam epitaxy / X.Z. Shang, S. D. Wu, C. Liu, W.X. Wang, L.W. Guo, Q. Huang, J. M. Zhou // J. Phys. D: Appl. Phys. 2006. V. 39. P. 1800–1804.
- [48] Cordier, Y. Surface morphology and strain relaxation of InAlAs buffer layers grown lattice mismatched on GaAs with inverse steps / Y. Cordier, D. Ferre, J.-M. Chauveau, J. Dipersio // Applied Surface Science. 2000. V. 166. P. 442–445.
- [49] Molina, S.I. Strain relief in linearly graded composition buffer layers: A design scheme to grow dislocation free (< 10<sup>5</sup> cm<sup>-2</sup>) and unstrained epilayers / S. I. Molina, F. J. Pacheco, D. Araújo, R. García, A. Sacedón, E. Calleja, Z. Yang // Applied Physics Letters. 1994. V. 65. P. 2460.
- [50] Capotondi, F. Strain induced effects on the transport properties of metamorphic InAlAs/InGaAs quantum wells / F. Capotondi, G. Biasiol, T. D. Ercolani, V. Grillo, E. Carlino, F. Romanato, L. Sorba // Thin Solid Films. 2005. V. 484. P. 400–407.
- [51] Galiev, G.B. MetamorphicInAlAs/InGaAs/InAlAs/GaAs HEMT heterostructures containing strained superlattices and inverse steps in the metamorphic buffer / G.B. Galiev, I.S.Vasil'evskii, S.S.Pushkarev, E.A.Klimov, R.M.Imamov, P.A.Buffat, B. Dwir, E.I.Suvorova // Journal of Crystal Growth. 2013. V. 366. P. 55–60.

- [52] Romanato, F. Strain relaxation in graded composition In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs buffer layers / F. Romanato, E. Napolitani, A. Carnera, A. V. Drigo, L. Lazzarini, G. Salviati, C. Ferrari, A. Bosacchi, S. Franchi // J. Appl. Phys. 1999. V. 86. P. 4748.
- [53] Gao, H.-L. Influence of V/III ratio on the structural and photoluminescence properties of InAlAs/InGaAs metamorphic high electron mobility transistor grown by molecular beam epitaxy / Gao H.-L., Zeng Y.-P., Wang B.-Q., Zhu Z.-P., Wang Z.-G. // Chinese Phys. B. 2008. V. 17. P. 1119. [54] Ашкрофт, Н. Физика твердого тела. В 2-х томах / Н. Ашкрофт, Н. Мермин. М.: Мир,
- [54] Ашкрофт, Н. Физика твердого тела. В 2-х томах / Н. Ашкрофт, Н. Мермин. М.: Мир, 1979. 824 с.
- [55] Ando, T. Self-Consistent results for a GaAs/AlGaAs heterojunction. II. Low temperature mobility / T. Ando // Journal of the Physical Society of Japan. 1982. Vol. 51. No. 12. P. 3893.
- [56] Capotondi, F. Scattering mechanisms in undoped InGaAs/InAlAs two-dimensional electron gases / F. Capotondi, G. Biasiol, D. Ercolani // Journal of Crystal Growth. 2005. V. 278. PP. 538–543.
- [57] Ramvall, P. GaInAs/InP quantum wells with extremely high and anisotropic two-dimensional electron gas mobilities / P. Ramvall, N. Carlsson, P. Omling, L. Samuelson, W. Seifert, M. Stolze, Q. Wang // Appl. Phys. Lett. 1996. V. 68 (8). P. 1111.
- [58] Ковалев, А.Н. Транзисторы на основе полупроводниковых наногетероструктур / А.Н. Ковалев. М.: Изд. Дом МИСиС, 2011. 364 с.
- [59] Hirakawa, K. Mobility of the two-dimensional electron gas at selectively doped n-type AlGaAs/GaAs heterojunctions with controlled electron concentrations / K. Hirakawa, H. Sakaki // Phys. Rev. B. 1986. V. 33. P. 8291.
- [60] Inoue, K. Electron mobilities in modulation-doped AlGaAs/GaAs and pseudomorphic AlGaAs/InGaAs quantum-well structures / K. Inoue, T. Matsuno // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 3771.
- [ 61 ] Inoue, K. High-quality InGaAs/InAlAs modulation-doped heterostructures grown lattice-mismatched on GaAs substrates / K. Inoue, J.C. Harmand, T. Matsuno // Journal of Crystal Growth. 1991. V. 111. P. 313.
- [62] Gozu, S. Low Temperature High Electron Mobility in InGaAs/InAlAs Modulation Doped Hetrostructures Grown on GaAs Substrate / S. Gozu, C. Hong, S. Yamada // Jpn. J. Appl. Phys. 1998. V. 37. P. L1501.
- [63] Lundstrom, M. Fundamentals of Carrier Transport / M. Lundstrom. Cambridge: Cambridge University Press, 2000. 418 p.
- [64] Hong, W.P. Low and high field transport properties of pseudomorphic In GaAs/InAlAs modulation doped heterostructures / W.P. Hong, G. I. Ng, P. K. Bhattacharya, D. Pavlidis, S. Willing, B. Das // Journal of Applied Physics. 1988. V. 64. P. 1945.

- [65] Pavesi, L. Photoluminescence of AlGaAs alloys / L. Pavesi, M. Guzzi // J. Appl. Phys. 1994. V. 75. P. 4779.
- [66] Adachi, S. Physical Properties of III–V Semiconductor Compounds: InP, InAs, GaAs, GaP, InGaAs, and InGaAsP/S. Adachi. New York: John Wiley & Sons, 1992. 329 p.
- [67] Lyon, S.A. Spectroscopy of hot carriers in semiconductors / S.A. Lyon // J. Lumin. 1986. V. 35. P. 121.
- [68] Бонч-Бруевич, В.Л. Физика полупроводников / В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. М.: Наука, 1977.-672 с.
- [69] Bimberg, D. Photolumineseence of pure InGaAs alloys / D. Bimberg, B. Srocka // Properties of lattice-matched and strained Indium Gallium Arsenide / edited by P. Bhattacharya. London: INSPEC, the Institution of Electrical Engineers, 1993. P. 159 168.
- [70] High-precision bandgap determination of  $Al_{0.48}In_{0.52}As$  with optical and structural methods / D. Oertel, D. Bimberg, R. K. Bauer, K. W. Carey // Appl. Phys. Lett. 1989. V. 55. P. 140.
- [71] Демиховский, В.Я. Физика квантовых низкоразмерных структур / В.Я. Демиховский, Г.А. Вугальтер. М.: Логос, 2000. 248 с.
- [72] Miller, R. C. Excitons in GaAs quantum wells / R. C. Miller, D. A. Kleinman // J. Luminescence. 1985. V. 30. P. 520-540.
- [73] Chemla, D. S. Room-temperature excitonic nonlinear-optical effects in semiconductor quantum-well structures / D. S. Chemla, D. A. B. Miller // J. Opt. Soc. Amer. B. 1985. P. 1155-1173.
- [74] Галиев, Г.Б. Фотолюминесцентные исследования двойных квантовых ям AlGaAs/GaAs с тонким разделяющим AlAs-слоем / Г.Б. Галиев, М.В. Карачевцева, В.Г. Мокеров, В.А. Страхов, Г.Н. Шкердин, Н.Г. Яременко //  $\Phi$ ТП. 2003. Т.37. С. 599-603.
- [75] Colocci, M. Thermal ionization of excitons in GaAs/AlGaAs quantum well structures / M. Colocci, M. Gurioli, A. Vinattieri // Journal of Applied Physics. 1990. V. 68. P. 2809.
- [ 76 ] Карачевцева, М.В. Температурные исследования фотолюминесценции структур InGaAs/GaAs с квантовыми ямами / М.В. Карачевцева, А.С. Игнатьев, В.Г. Мокеров, Г.З. Немцев, В.А. Страхов, Н.Г. Яременко // ФТП. 1994. Т. 28. С. 1211 1218.
- [77] Muraki, K. Surface segregation of In atoms during molecular beam epitaxy and its influence on the energy levels in InGaAs/GaAs quantum wells / K. Muraki, S. Fukatsu, Y. Shiraki and R. Ito // Appl. Phys. Lett. 1992. V. 61. P. 557.
- [78] Chen, Y. Absorption and photoluminescence studies of the temperature dependence of exciton life time in lattice-matched and strained quantum well systems / Y. Chen, G.P. Kothiyal1, J. Singh, P.K. Bhattacharya // Superlattices and Microstructures. 1987. V. 3. P. 657 664.

- [79] Tränkle G. Quasi-two-dimensional electron-hole plasma in GaAs-GaAlAs MQW structures: Band-filling effects and band-gap renormalization / G. Tränkle, H. Leier, A. Forchel, G. Weimann // Surface Science. 1986. V. 174. P. 211-15.
- [80] Bastard, G. Exciton binding energy in quantum wells / G. Bastard, E.E. Mendez, L.L. Chang, L. Esaki // Physical Review B. 1982. V. 26. P. 1974.
- [81] Schmitt-Rink, S. Excitons and electron-hole plasma in quasi-two-dimensional systems / S. Schmitt-Rink, C. Ell // Journ. of Luminescence. 1985. V. 30. P. 585.
- [82] Harris, C.I. Doping-density dependence of photoluminescence in highly Si-doped GaAs/AlGaAs quantum wells from below to above the metallic limit / C.I. Harris, B. Monemar, H. Kalt, K. Kohler // Phys. Rev. B. 1993. V. 48. P. 4686.
- [ 83 ] Хабибуллин Р.А. Влияние встроенного электрического поля на оптические и электрофизические свойства Р-НЕМТ наногетероструктур AlGaAs/InGaAs/GaAs / Р.А. Хабибуллин, И.С. Васильевский, Г.Б. Галиев, Е.А. Климов, Д.С. Пономарев, В.П. Гладков, В.А. Кульбачинский, А.Н. Клочков, Н.А. Юзеева // Физика и техника полупроводников. 2011. Т. 45. Вып. 5. С. 666 671.
- [84] Yu, P.W. Temperature dependence of photoluminescence in modulation doped pseudomorphic high electron mobility transistor Al GaAs/InGaAs/GaAs structures / P. W. Yu, B. Jogai, T. J. Rogers, P. A. Martin, J. M. Ballingall // Journal of Applied Physics. 1994. V. 76. P. 7535.
- [85] Livescu, G. Free Carrier and Many-Body Effects in Absorption Spectra of Modulation-Doped Quantum Wells / G. Livescu, D.A.B. Miller, D.S. Chemla, M. Ramaswamy, T.Y. Chang, N. Sauer, A.C. Gossard, J.H. English // IEEE Journal of Quantum Electronics. 1988. V. 24. P. 1677.
- [86] Meynadier, M. H. Spectroscopy of a high-mobility GaAs-GaAlAs one-side-modulation-doped quantum well / M. H. Meynadier, J. Orgonasi, C. Delalande, J. A. Brum, G. Bastard, and M. Voos // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. P. 2482-2485.
- [87] Delalande, C. Band gap renormalization in a GaAs-GaAlAs modulation doped quantum well / C. Delalande, J. Orgonasi, M.H. Meynadier, J.A. Brum, G. Bastard, G. Welmann, W. Schlapp // Solid State Communications. 1986. V. 59. P. 613-617.
- [88] Gilpérez, J. M. Room and low temperature assessment of pseudomorphic AlGaAs/InGaAs/GaAs high electron mobility transistor structures by photoluminescence spectroscopy / J. M. Gilpérez, J. L. SánchezRojas, E. Muñoz, E. Calleja, J. P. R. David // J. Appl. Phys. 1994. V. 76. P. 5931.
- [89] Miller, D.A.B. Electric field dependence of optical absorption near the band gap of quantum-well structures / D. A. B. Miller, D. S. Chemla, T. C. Damen, A. C. Gossard, W.Wiegman, T. H. Wood, C. A. Bums // Phys. Rev. 1985. V. 932. P. 1043-1060.

- [90] Haug, H. Basic mechanisms of the optical nonlinearities of semiconductors near the band edge // J. Opt. Soc. Am. B. 1985. V. 30. P. 585.
- [91] Pinczuk, A. Optical processes of 2D electron plasma in GaAs-(AlGa)As heterostructures / A. Pinczuk, J. Shah, R.C. Miller, A.C. Gossard, W. Wiegmann // Solid State Communications. 1984. V. 50. P. 735-739.
- [92] Kleinman, D. A. Band-gap renormalization in semiconductor quantum wells containing carriers / D. A. Kleinman and R. C. Miller // Phys. Rev. B. 1985. V. 32. P. 2266-2272.
- [93] Cingolani R. Electronic states and optical transitions in modulation-doped n-type GaInAs/AlInAs multiple quantum wells / R. Cingolani, W. Stolz, K. Ploog // Phys. Rev. B. 1989. V. 40. P. 2950.
- [94] Skolnick, M. S. Observation of a many-body edge singularity in quantum well luminescence spectra / M. S. Skolnick, J. M. Rorison, K. J. Nash, D. J. Mowbray, P. R. Tapster, S. J. Bass, A. D. Pitt // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. P. 2130-2133.
- [95] Leitch, W.E. Photoluminescence Analysis of InAIAs-lnGaAs HFET Material with Varied Placement of Heavy δ-Doping / W.E. Leitch, B.U. Henle, E.Kohn // Journal of E]ectronic Materials. 1996. V. 25. P. 1652.
- [96] Brierley, S.K. Quantitative characterization of modulationdoped strained quantum wells through line shape analysis of room temperature photoluminescence spectra / S.K. Brierley // J. Appl. Phys. -1993. V. 74. P. 2760.
- [97] Skolnick, M. S. Free-carrier effects on luminescence linewidths in quantum wells / M. S. Skolnick, K. J. Nash. M. K. Saker, S. J. Bass, P. A. Claxton, J. S. Roberts // Appl. Phys. Lett. 1987. V. 50. P. 1885.
- [98] Lyo, S. K. Photoluminescence line shape in degenerate semiconductor quantum wells / S. K. Lyo, E. D. Jones // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. P. 4113.
- [99] Rorison, J. M. Many-body effects in optical spectra of n-doped alloy semiconductor quantum-well structures / J. M. Rorison // J. Phys. C: Solid State Phys. 1987. V. 20. P. L311.
- [100] Brugger, H. Optical determination of carrier density in pseudomorphic AlGaAs/InGaAs/GaAs hetero-field-effect transistor structures by photoluminescence / H. Brugger, H. Müssig, C. Wölk, K. Kern, D. Heitmann // Appl. Phys. Lett. 1991. V. 59. P. 2739.
- [101] Lin, D.Y. Optical studies of two-dimensional electron gas in an InGaAs/AlGaAs pseudomorphic high electron mobility transistor structure / D.Y. Lin, M.C. Wu, H.J. Lin, J.S. Wu // Physica E. 2008. V. 40. P. 1757–1759.
- [102] Colvard, C. Optical investigations of the high-density electron gas in pseudomorphic InGaAs quantum-well structures / C. Colvard, N. Nouri, D. Ackley // Phys. Rev. B. 1989. V.39. 8033.

- [103] Яременко, Н.Г. Определение концентрации двумерных электронов в δ-легированных псевдоморфных транзисторных структурах InGaAs/GaAs методом фотолюминесцентной спектроскопии / Н.Г. Яременко, Г.Б. Галиев, И.С. Васильевский, Е.А. Климов, М.В. Карачевцева, В.А. Страхов // Радиотехника и электроника. 2013. Т. 58. С. 276.
- [104] Martin P.A. Photoluminescence Evaluation of Pseudomorphic High Electron Mobility Transistor Device Wafers / P.A. Martin, J.M. Ballingall, P. Ho, T.J. Rogers // Journal of Electronic Materials. 1994. V. 23. P. 1303.
- [105] Lu, W. Nondestructive determination of sheet carrier density in pseudomorphic AlGaAs/InGaAs/GaAs HEMT structures by room-temperature photoluminescence spectra / W. Lu, J. Lee, K. Prasad, G Ng, P. Lindstrom // J. Phys. D: Appl. Phys. 1998. V. 31. P. 159.
- [106] Lin. D.Y. Room-temperature photoreflectance and photoluminescence characterization of the AlGaAs/InGaAs/GaAs pseudomorphic high electron mobility transistor structures with varied quantum well compositional profiles / D. Y. Lin, S. H. Liang, Y. S. Huang, K. K. Tiong, Fred H. Pollak // J. Appl. Phys. 1999. V. 85. P. 8235.
- [107] Dodabalapur, A. Relationship between photoluminescence spectra and low field electrical properties of modulation doped AlGaAs/GaAs quantum wells / A. Dodabalapur, K. Sadra, B. G. Streetman // J. Appl. Phys. 1990. V. 68. P. 4119.
- [108] Brierly, S.K. Photoluminescence characterization of pseudomorphic modulation doped quantum wells at high carrier sheet densities / S.K. Brierley, W.E. Hoke, P.S. Lyman, H.T. Hendriks // Appl. Phys. Lett. 1991. V. 59. P. 3306.
- [ 109 ] Brierly, S.K. Precise determination of indium composition and channel thickness in pseudomorphic high electron mobility transistors using room temperature photoluminescence / S.K. Brierley, A. Torabi, P.S. Lyman // Journ. of Appl. Phys. 1999. V. 86. P. 914.
- [110] Radhakrishnan, K. InP/InGaAs high electron mobilitytransistor structures grown by solid source molecular beam epitaxy / K. Radhakrishnan, T.H.K. Patrick, H.Q. Zheng, P.H. Zhang, S.F. Yoon // Journal of Crystal Growth. 1999. V. 207. P. 8-14.
- [111] Lee, K.E. High-quality metamorphic compositionally graded InGaAs buffers / K. E.Lee, E.A. Fitzgerald //Journal of Crystal Growth. 2010. V. 312. P. 250–257.
- [112] Watanabe, K. Nondestructive evaluation of channel carrier concentration in modulation doped InAlAs/InGaAs field-effect transistor structures by room-temperature photoluminescence / K. Watanabe, H.Yokoyama // J. Appl. Phys. 1999. V. 86. P. 4333.
- [113] Cui, L.J. Correlation between optical and electrical properties in InAlAs/InGaAs metamorphic high-electron-mobility-transistor structures on GaAs substrates / L. J. Cui, Y. P. Zeng, B. Q. Wang, Z. P. Zhu, S. L. Guo // J. Appl. Phys. 2006. V. 100. P. 033705.

- [114] Shang, X.Z. Room temperature photoluminescence evaluation of In<sub>0.29</sub>Al<sub>0.71</sub>As/In<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As/GaAs metamorphic high electron mobility transistor structures / X.Z. Shang, Jing Wu, W.C. Wang, W.X. Wang, Q. Huang, J.M. Zhou // Solid-State Electronics. 2007. V. 51. P. 85.
- [115] Wallart, X. Performances and limitations of InAs/InAlAs metamorphic heterostructures on InP for high mobility devices / X. Wallart, J. Lastennet, D. Vignaud, F. Mollot // Appl. Phys. Lett. 2005. V. 87. P. 043504.
- [116] Случинская, И.А. Основы материаловедения и технологии полупроводников / И.А. Случинская. М.: МИФИ, 2002. 376 с.
- [117] Эсаки, Л. Молекулярно-лучевая эпитаксия и развитие технологии полупроводниковых сверхрешеток и структур с квантовыми ямами / Л. Эсаки // Молекулярно-лучевая эпитаксия и гетероструктуры : Пер. с англ. / ред. Л. Ченг, К. Плог. М. : Мир, 1989. Гл. 1. С. 7-36.
- [118] Alavi, K. Molecular Beam Epitaxy / K. Alavi // Handbook of Compound Semiconductors: Growth, Processing, Characterization and Devices / Edited by P.H. Holloway and G.E. McGuire. Noyes Publications, 1996. Ch. 3. PP. 84 169.
- [119] Hoke, W.E. Molecular beam epitaxial growth and device performance of metamorphic high electron mobility transistor structures fabricated on GaAs substrates / W.E. Hoke, P.J. Lemonias, J.J. Mosca, P.S. Lyman, A. Torabi, P.F. Marsh // J. Vac. Sci. Technol. B. 1999. V. 17. P. 1131.
- [120] Шуберт, Ф. Светодиоды / Пер. с англ. под ред. А.Э. Юновича. 2-е изд. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. 496 с.
- [121] Arthur, J.R. Molecular beam epitaxy / J.R. Arthur // Surf.Science. 2002. V. 500. P. 189–217.
- [122] Davies, G. J. Arsenic stabilization of InP substrates for growth of  $Ga_xIn_{1-x}As$  layers by molecular beam epitaxy / G. J. Davies, R. Heckingbottom, H. Ohno, C. E. C. Wood, A. R. Calawa // Applied Physics Letters. 1980. Vol. 37. P. 290.
- [123] Grange, J.D. The Growth of MBE III-V Compounds and Alloys / J.D. Grange // The Technology and Physics of Molecular Beam Epitaxy / edited by E. Parker. Plenum, New York, 1985. P. 47–59.
- [124] Farrow, R. F. C. Stabilization of surfaces of III-V compound crystals by molecular beams / R. F. C. Farrow // J. Phys. D: Appl. Phys. 1975. Vol. 8. P. L87.
- [125] Cheng, K. Y. Molecular beam epitaxial growth of uniform In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As on InP with a coaxial In-Ga oven / K. Y. Cheng, A. Y. Cho, W. R. Wagner, W. A. Bonner // Journal of Applied Physics. 1981. Vol. 52. P. 1015.
- [126] Watanabe, A. Investigation of InP surface under arsenic pressure using RHEED-TRAXS / A. Watanabe, T. Isu, Masayuki Hata, Y. Katayama // Journal of Crystal Growth. 1991. Vol. 115, Is. 1–4. P. 371–374.

- [ 127 ] Чо, А.И. Выращивание методом молекулярно-лучевой эпитаксии и свойства полупроводников  $A^{III}B^V$  / А.И. Чо // Молекулярно-лучевая эпитаксия и гетероструктуры : Пер. с англ. / ред. Л. Ченг, К. Плог. М. : Мир, 1989. Гл. 6. С. 161-188.
- [128] Turco, F. Thermodynamic analysis of the molecular-beam epitaxy of  $Al_{1-x}In_xAs$  on InP and GaAs (001) substrates / F. Turco, J. Massies, J. C. Guillaume, J. P. Contour // J. Vac. Sci. Technol. B. -1988. Vol. 6. P. 775.
- [ 129 ] Wood, C. Molecular-Beam Epitaxial Group III Arsenide Alloys: Effect of Substrate Temperature on Composition / C. Wood, D. Morgan, L. Rathbun // J. Appl. Phys. 1982. V. 53. P. 4524–4527.
- [130] Karpov, S.Yu. Indium segregation kinetics in InGaAs ternary compounds / S.Yu. Karpov, Yu.N. Makarov // Thin Solid Films. 2000. V. 380. P. 71 74.
- [131] Choi, W.-Y. Growth Optimization of Molecular Beam Epitaxy Grown InAlAs on InP / W.-Y. Choi, C. Fonstad // J. Vac. Sci. Tech. B. 1994. Vol. 12, No. 2. P.1013–1015.
- [132] Yoon, S.F. Effects of substrate temperature and V/III flux ratio on the growth of InAlAs on InP substrates by molecular beam epitaxy / S.F. Yoon, Y.B. Miao, K. Radhakrishnan, S. Swaminathan // Journal of Crystal Growth. 1994. Vol. 144. P. 121–125.
- [133] Scott, E. Factors Affecting the Growth of an Integrated Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As/InP PIN-FET by Molecular Beam Epitaxy / E. Scott, D. Wake, A. Livingstone, D. Andrews, G. Davis // J. Vac. Sci. Tech. B. 1985. Vol. 3. P. 816-819.
- [134] Singh, J. Role of kinetics and thermodynamics in alloy clustering and surface quality in InAlAs grown by molecular-beam epitaxy: Consequences for optical and transport properties / J. Singh, S. Dudley, B. Davies, K. K. Bajaj // J. Appl. Phys. 1987. Vol. 60. P. 3167.
- [135] Chu, P. Schottky barrier height of  $In_xAl_{1-x}As$  epitaxial and strained layers / P. Chu, C. Lin, H. H. Wieder // Appl. Phys. Lett. 1988. Vol. 53. P. 2423.
- [136] Berger, P.R. Investigation of crystalline and optical properties of  $Al_{0.48}In_{0.52}As$  grown by molecular-beam expitaxy / P. R. Berger, P. K. Bhattacharya, J. Singh // J. Appl. Phys. 1987. Vol. 61. P. 2856.
- [137] Oh, J. E. The dependence of the electrical and optical properties of molecular beam epitaxial  $In_{0.52}Al_{0.48}As$  on growth parameters: Interplay of surface kinetics and thermodynamics / J. E. Oh, P. K. Bhattacharya, Y. C. Chen, O. Aina, M. Mattingly // J. Electron. Mater. 1990. Vol. 19. P. 435.
- [138] Haupt, M. Growth of high quality  $Al_{0.48}In_{0.52}As/Ga_{0.47}In_{0.53}As$  heterostructures using strain relaxed  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As$  buffer layers on GaAs / M. Haupt, K. Kohler, P. Ganser, S. Emminger, S. Muller, W. Rothemund // Appl. Phys. Lett. 1996. V. 69. P. 412.

- [139] Cordier, Y. Influence of MBE growth conditions on the quality of InAlAs/InGaAs metamorphic HEMTs on GaAs / Y. Cordier, P. Lorenzini, J.-M. Chauveau, D. Ferre, Y. Androussi, J. DiPersio, D. Vignaud, J.-L. Codron // Journal of Crystal Growth. 2003. V. 251. P. 822–826.
- [140] Yahyaoui, N. Optical properties of compositionally graded In<sub>x</sub>Al<sub>1-x</sub>As/GaAs heterostructures / N. Yahyaoui, S. Aloulou, R. Chtourou, A. Sfaxi // Thin Solid Films. 2008. V. 516. P. 1604–1607. [141] Li, H. Growth and characterization of InGaAs/InAlAs/InP high-electron-mobility transistor
- structures towards high channel conductivity / H. Li, J. Wu, Z. Wang, J. Liang, B. Xu, C. Jiang, Q. Gong, F. Liu, W. Zhou // Journal of Crystal Growth. 1998. Vol. 186. P. 309.
- [142] Fedoryshyn, Y. Growth parameter optimization and interface treatment for enhanced electron mobility in heavily strained GaInAs/AlInAs high electron mobility transistor structures / Y. Fedoryshyn, O. Ostinelli, A. Alt, A. Pallin // Journal of Applied Physics. 2014. V. 115. P. 043718.
- [143] Pamulapati, J. The relation of the performance characteristics of pseudomorphic InGaAs/InAlAs modulation-doped field-effect transistors to molecular-beam epitaxial growth modes / J. Pamulapati, R. Lai, G. I. Ng, Y. C. Chen, P. R. Berger // J. Appl. Phys. 1990. Vol. 68. P. 347.
- [144] Streit, D.C. Graded-channel InGaAs–InAlAs–InP high electron mobility transistors / D. C. Streit, T. R. Block, M. Wojtowicz, D. Pascua, R. Lai, G. I. Ng, P.-H. Liu, K.L. Tan // J. Vac. Sci. Technol. B. 1995. Vol. 13. P. 774.
- [145] Lin, Z.C. Mobility asymmetry in InGaAs/InAlAs heterostructures with InAs quantum wires / Z.C. Lin, W.H. Hsieh, C.P. Lee, Y.W. Suen // Nanotechnology. 2007. V. 18. P. 075403.
- [146] Ponchet, A. Relationship between self-organization and size of InAs islands on InP(001) grown by gas-source molecular beam epitaxy / A. Ponchet, A. Le Corre, H. L'Haridon, B. Lambert, S. Salaün // Applied Physics Letters. 1995. V. 67. P. 1850.
- [147] Dupuy, E. Low density of self-assembled InAs quantum dots grown by solid-source molecular beam epitaxy on InP(001) / E. Dupuy, P. Regreny, Y. Robach, M. Gendry, N. Chauvin, E. Tranvouez, G. Bremond, C. Bru-Chevallier, G. Patriarche // Applied Physics Letters. 2006. V. 89. P. 123112. [148] Groenen, J. Strain in InAs islands grown on InP (001) analyzed by Raman spectroscopy / J. Groenen, A. Mlayah, R. Carles, A. Ponchet, A. Le Corre, S. Salaün // Applied Physics Letters. 1996. V. 69. P. 943.
- [149] Hopkinson, M. Growth of strained InAs/InP quantum wells by molecular beam epitaxy / M. Hopkinson, J.P.R.David, P.A.Claxton, P.Kightley // Appl. Physics Letters. 1992. V. 60. P. 841. [150] Nakayama, T. Modulation doped structure with thick strained InAs channel beyond the critical thickness / T.Nakayama, H.Miyamoto // Journ. of Crystal Growth. 1999. V. 201/202. P. 782-785.

- [151] Tournie, E. Surface stoichiometry, epitaxial morphology and strain relaxation during molecular beam epitaxy of highly strained InAs/Ga<sub>0.47</sub>In<sub>0.53</sub>As heterostructures / E. Tournie, K.H. Ploog // Journal of Crystal Growth. 1994. V. 135. P. 97—112.
- [152] Lin, S.D. Self-assembled GaAs antiwires in In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As matrix on (100) InP substrates / S. D. Lin, C. P. Lee, W. H. Hsieh, Y. W. Suen // Applied Physics Letters. 2002. V. 81. P. 3007.
- [153] Lee, J.Y. Arsenic dependence on the morphology of ultrathin GaAs layers on In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As/InP / J.Y. Lee, C. Pearson, J.M. Millunchick // Journal of Applied Physics. 2008. V. 103. P. 104309.
- [ 154 ] Tournié, E. Structural properties and transport characteristics of pseudomorphic  $Ga_xIn_{1-x}As/Al_yIn_{1-y}As$  modulation-doped heterostructures grown by molecular-beam epitaxy / E. Tournié, L. Tapfer, T. Bever, K. Ploog // J. Appl. Phys. 1992. Vol. 71. P. 1790.
- [155] Лебедев, А.И. Физика полупроводниковых приборов / А.И. Лебедев. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. 488 с.
- [156] Кучис, Е.В. Методы исследования эффекта Холла / Е.В. Кучис. М.: Сов. радио, 1974. 328 с.
- [157] Зеегер, К. Физика полупроводников / К. Зеегер ; пер. с англ. под ред. Ю.К. Пожелы. М.: Мир, 1977. 616 с.
- [158] Ансельм, А.И. Введение в теорию полупроводников / А.И. Ансельм. М.: Наука, 1978. 618 с.
- [159] Фульц, Б. Просвечивающая электронная микроскопия и дифрактометрия материалов / Б. Фульц, Дж. М. Хау. М.: Техносфера, 2011. 904 с.
- [160] Walther, T. A new experimental procedure to quantify annular dark field images in scanning transmission electron microscopy / T.Walther // Journal of Microscopy. 2006. V. 221. P. 137.
- [161] Rao, D.V.S. Quantitative Strain and Compositional Studies of  $In_xGa_{1-x}As$  Epilayer in a GaAsbased pHEMT Device Structure by TEM Techniques / D.V.S. Rao, R. Sankarasubramanian, K. Muraleedharan, T. Mehrtens, A. Rosenauer // Microsc. Microanal. 2014. V. 20. P. 1262–1270.
- [162] Hohenberg, P. Inhomogeneous Electron Gas / P. Hohenberg, W. Kohn // Phys. Rev. 1964. V. 136. P. B864.
- [163] Kohn, W. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects / W. Kohn, L. J. Sham // Phys. Rev. A. 1965. V. 140. P. 1133.
- [164] Ando, T. Density-functional calculation of sub-band structure in accumulation and inversion layers / T. Ando // Phys. Rev. B. -1976. V. 13. P. 3468.
- [165] Löwdin, P.-O. A Note on the Quantum-Mechanical Perturbation Theory / P.-O. Löwdin // J. Chem. Phys. 1951. V. 19. P. 1396.

- [166] Pidgeon, C. R. Interband Magneto-Absorption and Faraday Rotation in InSb / C. R. Pidgeon, R. N. Brown // Phys. Rev. 1966. V. 146. P. 575.
- [167] Bastard, G. Electronic States in Semiconductor Heterostructures / G. Bastard, J.A. Brum // IEEE Journ. of Quantum Electronics. 1986. V. QE-22. P. 1625.
- [168] Perdew, J.P. Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems / J.P. Perdew, A. Zunger // Phys. Rev. B. 1981. V. 23. P. 5048.
- [169] Birner, S. Nextnano: General Purpose 3-D Simulations / S. Birner, T. Zibold, T. Andlauer, T. Kubis // Electron Devices, IEEE Transactions on. 2007. Vol. 54. P. 2137.
- [170] Avakyants, L.P. Interband optical transitions in GaAs modulation-doped quantum wells: photoreflectance experiment and self-consistent calculations / L.P. Avakyants, P.Yu. Bokov, A.V. Chervyakov, G.B. Galiev, E.A. Klimov, I.S. Vasil'evskii, V.A. Kulbachinskii // Semiconductor Science and Technology. 2006. V. 21. P. 462.
- [171] Bardeen, J. Surface States and Rectification at a Metal Semi-Conductor Contact / J. Bardeen // Phys. Rev. Lett. 1947. V. 71. P. 717.
- [172] Schubert, E.F. Fermi-level-pinning-induced impurity redistribution in semiconductors during epitaxial growth / E. F. Schubert, J. M. Kuo, R. F. Kopf, A. S. Jordan, H. S. Luftman, L. C. Hopkins // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. P. 1364.
- [173] Kajiyama, K. Schottky barrier height of n-InGaAs diodes / K. Kajiyama, Y. Mizushima, S. Sakata // Appl. Phys. Lett. 1973. V. 23. P. 458.
- [174] Sibille, A. Deep level transient spectroscopy of InP / A. Sibille // Properties of Indium Phosphide. EMIS Datareviews Series no. 6. London and New York: INSPEC, The Institution of Electrical Engineers. 1991. P. 239-241.
- [175] Masselink, W.T. Pseudomorphic modulation-doped AlGaAs/InGaAs/GaAs heterostructures with strong manifestation of many-body effects / W.T. Masselink, H. Kissel, U.Mueller, C. Walther, Yu.I. Mazur // Semicond. Phys., Quant. Electronics and Optoelectronics. − 2000. − Vol. 3, № 2. − P. 126.
- [176] Ho, C.-H. Temperature-dependent photoreflectance and photoluminescence characterization of the subband structure and built-in electric field of GaAs/GaInAs graded-channel high electron mobility transistor structures / C.-H.Ho, J.-S.Li, Yu-S.Lin // Semicond. Sci. Tech. 2009. V. 24. P. 035013.
- [ 177 ] Yu, P.W. Temperature dependence of photoluminescence linewidth in modulation-doped pseudomorphic high electron mobility transistor  $Al_xGa_{1-x}As/In_yGa_{1-y}As/GaAs$  structures / P. W. Yu, B. Jogai, T. J. Rogers // Appl. Phys. Lett. 1994. Vol. 65. P. 3263.
- [178] T. Kitada, T. Aoki, I. Watanabe, S. Shimomura, S. Hiyamizu. Temperature dependence of photoluminescence linewidth in modulation-doped pseudomorphic high electron mobility transistor Al Ga As/In Ga As/GaAs structures // Journal of Crystal Growth. 2001. V. 227–228. P. 289.

- [ 179 ] M. Tomizawa, T. Furuta, K.Yokoyama, A. Yoshii. Modeling for electron transport in AlGaAs/GaAs/AlGaAs double-heterojunction structures // IEEE Trans. Electr. Devices. 1989. Vol. 36, No. 11. P. 2380.
- [180] B. Jogai, P. W. Yu, D. C. Streit. Free electron distribution in δ-doped InGaAs/AlGaAs pseudomorphic high electron mobility transistor structures // J. Appl. Phys. 1994. V. 75. P. 1586.
- [181] M.-L. Ke, D. Westwood, R. H. Williams, M. J. Godfrey. Theoretical and experimental investigations of the electronic structure for selectively  $\delta$ -doped strained  $In_xGa_{1-x}As/GaAs$  quantum wells // Phys. Rev. B. 1995. Vol. 51 (8). P. 5038.
- [182] D.U. Lee, T.W. Kim, K.H. Yoo. Dependence of the electronic parameters on the  $In_yGa_{1-y}As$  quantum well width in modulation-doped  $Al_xGa_{1-x}As/In_yGa_{1-y}As/GaAs$  strained single quantum wells // Appl. Surf. Sci. 2005. Vol. 240. P. 375.
- [183] F. Zhao, C. Liu. Hall and photoluminescence studies of effects of the thickness of an additional  $In_{0.3}Ga_{0.7}As$  layer in the center of  $In_{0.15}Ga_{0.85}As/Al_{0.25}Ga_{0.75}As/GaAs$  high electron mobility transistors // Mater. Sci. in Semicond. Processing. -2002. Vol. 5. P. 23.
- [184] E. A B Cole, T. Boettcher, C. M Snowden. Corrections to the calculation of bulk electron densities in quantum wells of HEMTs // Semicond. Sci. Technol. 1997. Vol. 12. P. 100.
- [185] Y. Nishio. Comparison between theoretical and experimental results for energy states of two-dimensional electron gas in pseudomorphically strained InAs high-electron-mobility transistors / Y. Nishio, T. Tange, N. Hirayama, T. Iida, Y. Takanashi // Japanese Journal of Applied Physics. 2014. V. 53. P. 04EF09.
- [186] Adachi, S. Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors / S. Adachi. Wiley, 2009. 422 p.
- [187] Denton, A.R. Vegard's law / A.R. Denton, N.W. Ashcroft // Phys. Rev. A. 1991. Vol. 43. P. 3161.
- [188] Vurgaftman, I. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys / I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan // J. Appl. Phys. 2001. Vol. 89. P. 5815.
- [189] Ю, П. Основы физики полупроводников / П. Ю, М. Кардона; пер. с англ. И.И. Решиной; под ред. Б. П. Захарчени. 3-е изд. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. 560 с.
- [190] Frensley, W. R. Theory of the energy-band lineup at an abrupt semiconductor heterojunction / W. R. Frensley, H. Kroemer // Physical Review B. 1977. Vol. 16. P. 2642.
- [191] Peressi, M. Band engineering at interfaces: theory and numerical experiments / M. Peressi, N. Binggeli, A. Baldereschi // J. Phys. D: Appl. Phys. 1998. Vol. 31. P. 1273.
- [192] Wei, S.-H. Calculated natural band offsets of all II–VI and III–V semiconductors: Chemical trends and role of cation *d* orbitals / S.-H.Wei, A.Zunger // Appl. Phys. Lett. 1998. V.72. P. 2011.

- [193] Kunc, K. Atomic structure and properties of polar Ge-GaAs(100) interfaces / K. Kunc, R. M. Martin // Phys. Rev. B. 1981. V. 24. P. 3445.
- [194] Seidel, W. Band discontinuities in In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As-InP and InP-Al<sub>y</sub>In<sub>1-y</sub>As heterostructures: Evidence of noncommutativity / W. Seidel, O. Krebs, P. Voisin, J. C. Harmand, F. Aristone, J. F. Palmier // Phys. Rev. B. 1997. V. 55. P. 2274.
- [195] Yu, E.T. Band Offsets in Semiconductor Heterojunctions / E. T. Yu, J. O. McCaldin, T. C. McGill // Solid State Physics. 1992. V. 46. P. 1–146.
- [196] Bollaert, S. The indium content in metamorphic  $In_xAl_{1-x}As/In_xGa_{1-x}As$  HEMTs on GaAs substrate: a new structure parameter / S. Bollaert, Y. Cordier, M. Zaknoune, H. Happy, V. Hoel, S. Lepilliet, D. Theron, A. Cappy // Solid-State Electronics. -2000. V.44. P.1021-1027.
- [197] Krijn, M.P.C.M. Heterojunction band offsets and effective masses in III-V quaternary alloys / M.P.C.M. Krijn // Semicond. Sci. Technol. 1991. V. 6. P. 27.
- [198] Ландау, Л.Д. Теоретическая физика. Том VII. Теория упругости / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. 4-е изд. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987. 248 с.
- [199] Osbourn, G.C. Strained-layer superlattices from lattice mismatched materials / G.C. Osbourn // J. Appl. Phys. 1982. Vol. 53. P.1586.
- [200] Hinckley, J.M. Influence of substrate composition and crystallographic orientation on the band structure of pseudomorphic Si-Ge alloy films / J.M. Hinckley, J. Singh // Phys. Rev. B. 1986. Vol. 42. P.3546.
- [201] Walle, C.G. Van de. Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory / C.G. Van de Walle // Physical Review B. 1989. V. 39. P. 1871.
- [202] Pollak, F.H. Piezo-Electroreflectance in Ge, GaAs, and Si / F.H. Pollak, M. Cardona // Phys. Rev. 1968. V. 172. P. 816.
- [203] Жуков, А.Е. Влияние рассогласования параметров решеток на структурные, оптические и транспортные свойства слоев InGaAs, выращиваемых методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках InP (100) / А.Е. Жуков, А.Ю. Егоров, В.М. Устинов, А.Ф. Цацульников, М.В. Максимов, Н.Н. Фалеев // Физика и техника полупроводников. 1997. Т. 31 (1). С. 19.
- [204] Foulon, Y. Band-offset transitivity in strained (001) heterointerfaces / Y. Foulon, C. Priester // Phys. Rev. B. 1992. V. 45. P. 6259.
- [205] Ji, G. Optical investigation of highly strained InGaAs GaAs multiple quantum wells / G. Ji, D. Huang, U. K. Reddy, T. S. Henderson, R. Houdré // J. Appl. Phys. 1987. V. 62. P. 3366.
- [206] Ben Jazia, A. Theoretical and experimental studies in n-type modulation-doped InGaAs/InAlAs/InP magnetic sensors / A. Ben Jazia, H. Mejri, F. Hassen, H. Maaref, G. Guillot // Journal of Applied Physics. 1999. V. 86. P. 1535.

- [207] Drouot, V. Design and growth investigations of strained InGaAs/InAlAs/InP heterostructures for high electron mobility transistor applications / V. Drouot, M. Gendry, C, Santinelli, X. Letartre, J. Tardy, P. Viktorovitch, G. Hollinger, M. Ambri // IEEE Trans. on El. Dev. 1996. V. 43. P.1326.
- [208] Dickmann, J. InAlAs/InGaAs Pseudomorphic High Electron Mobility Transistors with High Breakdown Voltages: Design and Performances / J. Dickmann, K. Riepe, A. Geyer, B.E. Maile // Jpn. J. Appl. Phys. -1996.-V.35.-P.10-15.
- [209] Nakata, Y. Extremely High 2DEG Concentration in Selectively Doped InGaAs/N-InAlAs Heterostructures Grown by MBE / Y. Nakata, S. Sasa, Y. Sugiyama, T. Fuji, S. Hiyamizu // Jap. Journ. of Appl. Phys. 1987. V. 26. P. L59-L61.
- [210] Nakayama, T. Enhancement of electron mobility by preventing pit formation at the InAlAs/InGaAs heterointerface using an inserted InGaAs layer / T. Nakayama, H. Miyamoto, E. Oishi, N. Samoto // Journ. of Cryst. Growth. 1995. V. 150. P. 1220-1224.
- [211] Bastard, G. Variational calculations on a quantum well in an electric field / G. Bastard, E.E. Mendez, L. L. Chang, L. Esaki // Phys. Rev. B. 1983. V. 28. P. 3241.
- [212] Miller, D.A.B. Band-Edge Electroabsorption in Quantum Well Structures: The Quantum-Confined Stark Effect / D. A. B. Miller, D. S. Chemla, T. C. Damen, A. C. Gossard, W. Wiegmann, T. H. Wood, C. A. Burrus // Phys. Rev. Lett. 1984. V. 53. P. 2173.
- [213] А. Шиленас, Ю. Пожела, К. Пожела, В. Юцене, И.С. Васильевский, Г.Б. Галиев, С.С. Пушкарев, Е.А. Климов. ФТП, **47** (3), 348 (2013).
- [214] Maeda, N. Dependence on channel potential structures of I–V characteristics in InAlAs/InGaAs pseudomorphic high electron mobility transistors / N., H. Ito, T. Enoki, Y. Ishii // Journal of Applied Physics. 1997. V. 81. P. 1552.
- [215] Д.С. Пономарев, И.С. Васильевский, Г.Б. Галиев, Е.А. Климов, Р.А. Хабибуллин, В.А. Кульбачинский, Н.А. Юзеева. ФТП, **46** (4), 500 (2012).
- [216] Галиев, Г.Б. Особенности фотолюминесценции НЕМТ-наногетероструктур с составной квантовой ямой InAlAs/InGaAs/InAs/InGaAs/InAlAs / Г.Б. Галиев, И.С. Васильевский, Е.А. Климов, А.Н. Клочков, Д.В. Лаврухин, С.С. Пушкарев, П.П. Мальцев // Физика и техника полупроводников. 2015. Т. 49. Вып. 2. С. 241 248.
- [217] Schowalter, M. Influence of surface segregation on the optical properties of semiconductor quantum wells / M. Schowalter, A. Rosenauer, D. Gerthsen // Applied Physics Letters. 2006. V. 88. P. 111906.
- [ 218 ] Устинов, В.М. Массивы напряженных квантовых точек InAs в матрице (In,Ga)As, выращенные на подложках InP методом молекулярно-пучковой эпитаксии / В.М. Устинов, А.Е.

- Жуков, А.Ф. Цацульников, А.Ю. Егоров, А.Р. Ковш, М.В. Максимов, А.А. Суворова, Н.А. Берт, П.С. Копьев // Физика и техника полупроводников. 1997. Т. 31 (10). С. 1256.
- [219] Li, H. Effects of the matrix on self-organization of InAs quantum nanostructures grown on InP substrates / H. Li, T. Daniels-Race, M.-A.Hasan // Applied Physics Letters. 2002. V. 80. P. 1367.
- [220] Pan, N. Low temperature InAlAs buffer layers using trimethylarsenic and arsine by metalorganic chemical vapor deposition / N. Pan, J. Carter, J. Elliott, H. Hendriks, S. Brierley, K. C. Hsieh // Applied Physics Letters. 1993. V. 63. P. 3029.
- [221] Olsthoorn, S. M. Photoluminescence properties of the Al<sub>0.48</sub>In<sub>0.52</sub>As/InP interface and the diffusion of carriers thereto / S. M. Olsthoorn, F. A. J. M. Driessen, L. J. Giling // Journal of Applied Physics. 1993. V. 73. P. 7804.
- [222] Brasil, M. J. S. P. Optical transitions and chemistry at the In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As/InP interface / M. J. S. P. Brasil, R. E. Nahory, W. E. Quinn, M. C. Tamargo, H. H. Farrell // Applied Physics Letters. 1992. V. 60. P.1981.
- [223] Vignaud, D. Photoluminescence study of the interface in type II InAlAs–InP heterostructures / D. Vignaud, X. Wallart, F. Mollot, B. Semage // J. Appl. Phys. 1998. V. 84 (4). P. 2138.
- [224] Bohrer, J. Interface inequivalence of the InP/InAlAs/InP staggered double heterostructure grown by metalorganic chemical vapor deposition / J. Böhrer, A. Krost, R. Heitz, F. Heinrichsdorff, L. Eckey, D. Bimberg, H. Cerva // Appl. Phys. Lett. 1996. V. 68. P. 1072.
- [225] Duez, V. Type II and mixed type I–II radiative recombinations in AlInAs–InP heterostructures / V. Duez, O. Vanbésien, D. Lippens, D. Vignaud, X. Wallart, F. Mollot // Journal of Applied Physics. 1999. V. 85. P. 2202.
- [226] Tournie, E. InAs/Ga $_{0.47}$ In $_{0.53}$ As quantum wells: A new III-V materials system for light emission in the mid-infrared wavelength range / E. Tourni $\ddot{\mu}$ , K.H. Ploog, C. Alibert // Applied Physics Letters. 1992. V. 61. P. 2808.
- [ 227 ] Галиев, Г.Б. Структурные и электрофизические свойства НЕМТ-наногетероструктур  $In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As/InP$  с различной комбинацией нановставок InAs и GaAs в квантовой яме / Г.Б. Галиев, А.Л. Васильев, И.С. Васильевский, Р.М. Имамов, Е.А. Климов, А.Н. Клочков, Д.В. Лаврухин, П.П. Мальцев, С.С. Пушкарев, И.Н. Трунькин. // Кристаллография. 2015. Т. 60. Вып. 3. С. 459 468.
- [228] Wallar, X. High-mobility InGaAs/InAlAs pseudomorphic heterostructures on InP (001) / X. Wallart, B. Pinsard, F. Mollot // Journal of Applies Physics. 2005. V. 97. P. 053706.
- [229] Яременко, Н.Г. Люминесцентная спектроскопия электронных и примесных состояний в эпитаксиальных слоях и наногетероструктурах на основе полупроводников  $A^{III}B^V$  и их твердых растворов : дис. . . . д-ра физ.-мат. наук: 01.04.10: защищена 20.09.2013. Фрязино, 2013. 383 с.

- [230] Xie, H. Infrared absorption enhancement in light and heavyhole inverted  $Ga_{1-x}In_xAs/Al_{1-y}In_yAs$  quantum wells / H. Xie, J. Katz, W. I. Wang // Appl. Phys. Lett. 1991. V. 59. P. 3601.
- [231] Wang, Y.H. Ultralow dark current ptype strainedlayer InGaAs/InAlAs quantum well infrared photodetector with background limited performance for T=100 K / Y. H. Wang, Sheng S. Li, J. Chu, P. Ho // Appl. Phys. Lett. 1994.- V. 64. P. 727.
- [232] González, L. Influence of buffer-layer surface morphology on the self-organized growth of InAs on InP(001) nanostructures / L. González, J. M. García, R. García, F. Briones, J. Martínez-Pastor, C. Ballesteros // Applied Physics Letters. 2000. V. 76. P. 1104.
- [233] Sobiesierski, Z. Observation of photoluminescence from InAs surface quantum wells grown on InP(100) by molecular beam epitaxy / Z. Sobiesierski, S.A. Clark, R.H. Williams // Applied Surface Science. 1992. V. 56-58. P. 703-707.
- [234] Vignaud, D. InAlAs/InP heterostructures: Influence of a thin InAs layer at the interface / D. Vignaud, X. Wallart, F. Mollot // Journal of Applied Physics. 1994. V. 76. P. 2324.
- [235] Chan C.-H. Optical characterization of InAlAs/InGaAs metamorphic high-electron mobility transistor structures with tensile and compressive strain / C.-H. Chan, C.-H. Ho, M.-K. Chen, Y.-S. Lin // Thin Solid Films. 2013. V. 529. P. 217.
- [236] Wu J.S. Comparison of two-dimensional electron gas of etched and unetched InAlAs/InGaAs/InAlAs metamorphic high electron mobility transistor structures / J.S. Wu, C.C. Hung, C.T. Lu, D.Y. Lin // Physica E. 2010. V. 42. P. 1212–1215.
- [237] Song, Y. Investigation of metamorphic InGaAs quantum wells using N-incorporated buffer on GaAs grown by MBE / Y. Song, S. Wang, X. Cao, Z. Lai, M. Sadeghi // Journal of Crystal Growth.. 2011. V. 323. P. 21.
- [ 238 ] Галиев, Г.Б. Влияние разориентации подложки (100) GaAs на электрофизические параметры и морфологию поверхности метаморфных HEMT наногетероструктур  $In_{0.7}Al_{0.3}As/In_{0.7}Ga_{0.3}As/In_{0.7}Al_{0.3}As$  / Г.Б. Галиев, С.С. Пушкарёв, И.С. Васильевский, Е.А. Климов, А.Н. Клочков, П.П. Мальцев // Физика и техника полупроводников. 2014. Т. 48. С. 67 72.
- [239] Galiev, G.B. Effect of (1 0 0) GaAs substrate misorientation on electrophysical parameters, structural properties and surface morphology of metamorphic HEMT nanoheterostructures InGaAs/InAlAs / G.B. Galiev, I.S. Vasilevskii, E.A. Klimov, S.S. Pushkarev, A.N. Klochkov, P.P. Maltsev, M.Yu. Presniakov, I.N.Trunkin, A.L.Vasiliev // Journal of Crystal growth. 2014. V. 392. P. 11 19.
- [ 240 ] Галиев, Г.Б. Фотолюминесцентные исследования метаморфных наногетероструктур  $In_{0.7}Al_{0.3}As/In_{0.75}Ga_{0.25}As/In_{0.7}Al_{0.3}As$  на подложках GaAs / Г.Б. Галиев, Е.А. Климов, А.Н.

- Клочков, Д.В. Лаврухин, С.С. Пушкарев, П.П. Мальцев // Физика и техника полупроводников. 2014. T. 48. Вып. 5. С. 658 666.
- [241] Hellara, J. Optical properties of InP/InAlAs/InP grown by MOCVD on (100) substrates: influence of V/III molar ratio / J. Hellara, K. Borgi, H. Maaref, V. Souliere, Y. Monteil // Materials Science and Engineering: C. 2002. V. 21. P. 231.
- [242] Галиев, Г.Б. Электрофизические и структурные характеристики метаморфных НЕМТ наногетероструктур  $In_{0.38}Al_{0.62}As/In_{0.37}Ga_{0.63}As/In_{0.38}Al_{0.62}As$  / Г.Б. Галиев, Е.А. Климов, А.Н. Клочков, П.П. Мальцев, С.С. Пушкарёв, О.М. Жигалина, Р.М. Имамов, А.Н. Кускова, Д.Н. Хмеленин // Кристаллография. 2013. Т. 58. Вып. 6. С. 916 921.
- [ 243 ] Галиев, Г.Б. Применение спектроскопии фотолюминесценции для исследования метаморфных наногетероструктур  $In_{0.38}Al_{0.62}As/In_{0.38}Ga_{0.62}As/GaAs$  / Г.Б. Галиев, И.С. Васильевский, Е.А. Климов, А.Н. Клочков, Д.В. Лаврухин, С.С. Пушкарев, П.П. Мальцев. // Физика и техника полупроводников. 2014. Т. 48. Вып. 7. С. 909 916.
- [ 244 ] Mokerov, V.G. Photoluminescence of two-dimensional electron gas in metamorphic n-InAlAs/InGaAs/InAlAs heterostructures on GaAs (100) substrates / Mokerov V.G., Fedorov Yu.V., Guk A.V., Yaremenko N.G., Strakhov V.A. // Doklady Physics. − 1998. V. 43 (№ 9). − P. 547-551.