

Оптические и рентгеноструктурные исследования многослойных структур на основе твердых растворов InGaN/GaN

© С.О. Усов, А.Ф. Цацульников, Е.Е. Заварин, Р.Н. Кютт, Н.Н. Леденцов

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

E-mail: S.Usov@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 14 октября 2008 г.

В окончательной редакции 28 ноября 2008 г.)

Методами фотолюминесценции и рентгеновской дифракции высокого разрешения (HRXRD) проведено исследование многослойных структур на основе соединений $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$, выращенных методом газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений. Разработан способ анализа экспериментальных кривых качания многослойных структур в рамках модели Парратта–Спериози, который позволил определить толщины, период и средний состав слоев $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, а также деформацию активной области в исследуемых образцах. Локальное содержание индия было определено с использованием теоретической модели, которая описывает энергию излучения как функцию толщин слоев InGaN с учетом энергии квантового ограничения, энергий спонтанной и пьезополяризации и параметров, определенных из HRXRD.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 07-02-01246-а) и программой президиума РАН „Квантово-размерные наноструктуры“.

PACS: 78.55.-m, 78.67.Hc, 78.55.Cr, 78.67.De, 81.07.St, 61.05.cp, 64.75.Nx

1. Введение

В настоящее время наногетероструктуры на основе твердых растворов InGaN/GaN широко используются для создания светодиодов (СД), излучающих в видимом и ультрафиолетовом диапазонах. Согласно современным экспертным оценкам [1], световая отдача по мощности СД-структур L может достигать величины 200 lm/W.

Такая высокая световая отдача СД позволит вытеснить современные традиционные средства освещения, в частности лампы накаливания ($L = 15$ lm/W) и флуоресцентные лампы ($L = 88$ lm/W). Поэтому повышение эффективности и расширение спектрального диапазона излучения СД является одним из приоритетных направлений в современной технологии наногетероструктур. Наиболее эффективными неразрушающими методами анализа подобных структур являются фотолюминесценция (ФЛ) и рентгеновская дифракция высокого разрешения (HRXRD), которые позволяют получить спектральные характеристики излучения, а также определять состав, толщины (с точностью до 0.1%) и деформации слоев в исследуемых наногетероструктурах на основе материалов GaN, InN, AlN и их твердых растворов.

В настоящей работе проведен анализ образцов с использованием данных, полученных ФЛ и HRXRD в рамках модели, описывающей энергию электронных переходов с учетом энергий квантового ограничения и энергий спонтанной и пьезополяризации. Установлена связь между экспериментальными значениями положений максимумов ФЛ и расчетной энергией перехода с учетом экспериментальных структурных параметров.

2. Описание образцов и эксперимента

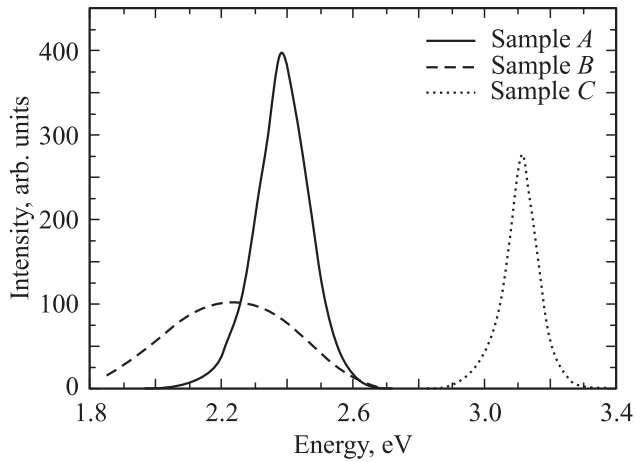
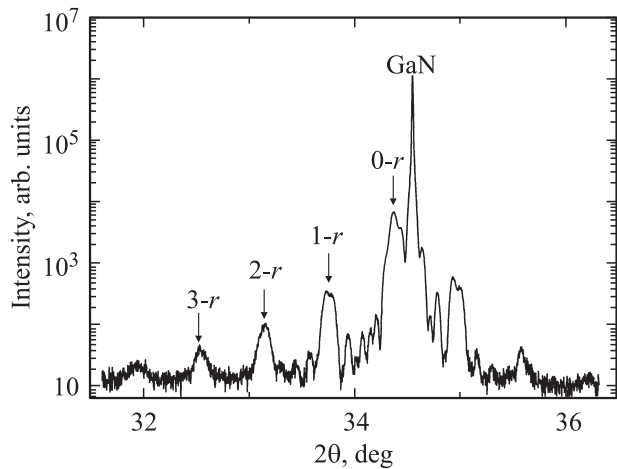
В работе проведены рентгеноструктурные и оптические исследования ряда образцов на основе InGaN/GaN, выращенных методом газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений (МОСVD), излучающих в диапазоне от ультрафиолетового до желтого в зависимости от содержания In. Образцы были выращены на сапфировых подложках на установках Aixtron 2000HT и Epique VP-50 RP.

Образец *A* содержит в активной области сверхрешетку (СР) из пяти слоев InGaN (толщиной 2 nm), разделенных барьерами GaN толщиной 8 nm. Температуры роста для четырех слоев InGaN T_{QW} и барьеров GaN T_{bar} были выбраны 825 и 925°C, для пятого слоя и барьера $T_{QW} = 800^\circ\text{C}$ и $T_{\text{bar}} = 900^\circ\text{C}$. Образец *B* содержит в активной области пять периодов InGaN, разделенных барьерами GaN $T_{QW}/T_{\text{bar}} = 720/770^\circ\text{C}$, причем каждый период состоит из двух слоев InGaN с меньшим и большим содержанием In. Образец *C* был выращен без использования субмонослойного режима роста [2,3] и состоял из пяти слоев InGaN толщиной 3 nm, разделенных AlGaIn-барьерами толщиной 9 nm каждый. Спектры фотолюминесценции были измерены с использованием микроскопа ЛОМО ЛЮМАМ-И2 с объективом $\times 10$ и диаметром апертуры 50 μm при возбуждении He–Cd-лазером с длиной волны 325 μm [3].

На рис. 1 представлены спектры ФЛ для образцов *A*, *B* и *C*, измеренные при 300 K. Положения максимумов составляют 2.4, 2.21 и 3.12 eV для образцов *A*, *B* и *C*. Дифракционные измерения структуры этих образцов были выполнены на установке BRUKER D8 DISCOVER с использованием $\text{CuK}\alpha$ -излучения методом $\omega-2\theta$ для

Таблица 1. Параметры роста и положения максимумов фотолюминесценции для образцов *A*, *B* и *C*

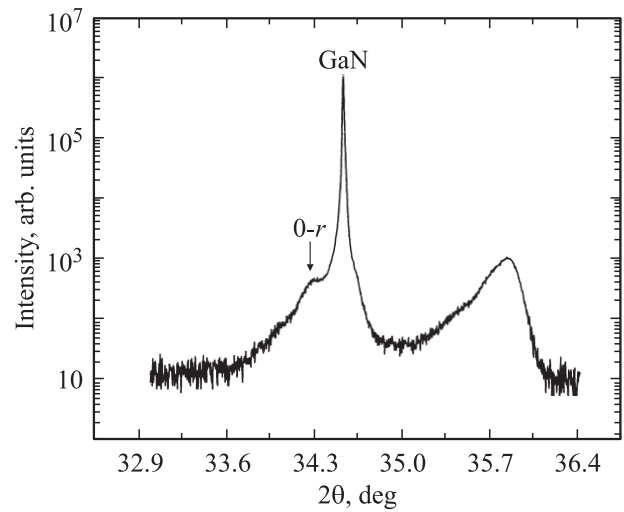
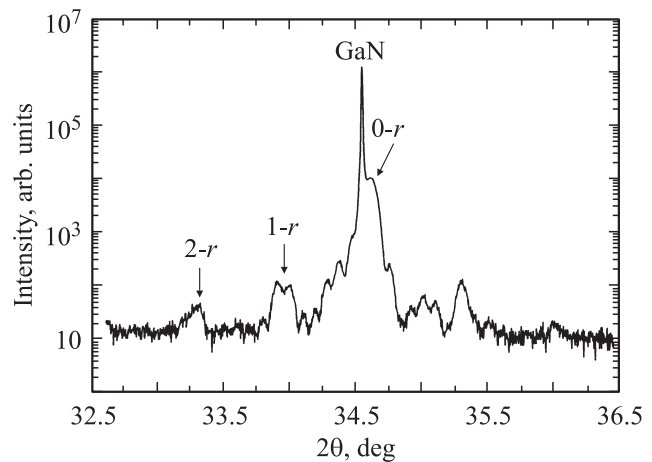
Образец	Параметры роста	Положение максимума ФЛ при комнатной температуре, eV/nm	Диапазон излучения
<i>A</i>	1 КЯ InGaN/GaN, $T_{QW}/T_{\text{barr}} = 800/900^\circ\text{C}$; 4 КЯ InGaN/GaN, $T_{QW}/T_{\text{barr}} = 825/925^\circ\text{C}$	2.4/516.7	Зеленый
<i>B</i>	5 КЯ InGaN/GaN, $T_{QW}/T_{\text{barr}} = 720/770^\circ\text{C}$	2.21/561	Желтый
<i>C</i>	5 КЯ InGaN/GaN, $T_{QW}/T_{\text{barr}} = 840/940^\circ\text{C}$, без субмонослойного режима роста	3.12/396.2	УФ

**Рис. 1.** Экспериментальные спектры фотолюминесценции для образцов *A*, *B* и *C* при температуре 300 К.**Рис. 2.** Экспериментальная кривая качания для образца *A*, полученная методом HRXRD.

симметричного брэгговского отражения (0002). Экспериментальные угловые зависимости интенсивности (кривые качания) для образцов *A*, *B* и *C* представлены на рис. 2–4 (табл. 1). Кривая качания для образца *A*, на которой выделены пики буферного слоя GaN и пики сверхструктурных сателлитов от нулевого до третьего поряд-

ка включительно, свидетельствует о достаточно высоком качестве слоев и наличии периодичности структуры.

Кривая качания для образца *B* не имеет характерных пиков осцилляций, обусловленных рефлексами сверхструктуры, что, по-видимому, связано с нарушением периодичности вдоль гексагональной оси *c*, а также

**Рис. 3.** Экспериментальная кривая качания для образца *B*, полученная методом HRXRD.**Рис. 4.** Экспериментальная кривая качания для образца *C*, полученная методом HRXRD.

с высокой дефектностью слоев. Для обработки таких экспериментальных кривых качания была разработана программа на основе модели Парратта–Спериози [4,5], которая обеспечивает эффективную первичную обработку дифракционных кривых качания с точностью до 10%.

3. Описание модели рентгеновской дифракции для многослойных структур

При анализе дифракционных кривых качания была использована модель дифракции рентгеновских лучей на многослойных периодических структурах [4,5], при этом однородные слои квантовой ямы (КЯ) и барьера описываются толщинами t_1 и t_2 , структурными факторами F_1 и F_2 и компонентами деформации ε_1 и ε_2 .

В этой модели предполагается, что эпитаксиальные слои однородны и находятся в кристаллическом состоянии. В рамках данной модели основной задачей является определение постоянных решеток a и c , толщин слоев и величин деформаций слоев, а также состава твердых растворов. В общем случае любой слой независимо от симметрии (кубической, тетрагональной или гексагональной) характеризуется двумя параметрами элементарной ячейки, причем для случая кубической элементарной ячейки $a = c$. Для полупроводниковых материалов, представляющих собой твердые растворы, параметры решетки зависят от состава твердого раствора и описываются законом Вегарда.

Постоянная решетки вдоль оси c определяется в соответствии с законом Брэгга в результате обработки экспериментальной кривой качания, измеренной относительно симметричного рефлекса. При анализе кривой качания, снятой относительно несимметричного рефлекса, можно определить постоянную решетки a .

Введем параметры a и c с индексами L для КЯ и B для барьера. Предположим, что экспериментальные значения параметров решетки для барьера (толстый слой) совпадают со случаем объемного материала. Для КЯ значения a и c вследствие деформации слоев изменяются в интервале от псевдоморфного случая, т.е. при $a_L = a_B$ и $c_L = c_B$, до релаксированного случая при $a_L = a_L^R$, $c_L = c_L^R$.

С учетом параметров барьера, которые соответствуют значениям для объемного материала, можно определить деформацию слоя КЯ относительно барьера

$$\frac{\Delta a}{a} = \frac{a_L - a_B}{a_B}, \quad \frac{\Delta c}{c} = \frac{c_L - c_B}{c_B}. \quad (1)$$

Так как изменения постоянной решетки Δa и Δc не являются независимыми, эти изменения можно выразить через компоненты тензора деформации и коэффициенты Пуассона

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_L - a_L^R}{a_L^R}, \quad \varepsilon_{zz} = \frac{c_L - c_L^R}{c_L^R}. \quad (2)$$

В настоящей работе экспериментальные измерения кривых качания были выполнены для симметричного (0002) рефлекса для трех исследуемых образцов A , B и C . Поэтому дальнейший анализ связан в основном с рассмотрением случая симметричных рефлексов.

Упругая деформация слоев $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ и GaN (или AlGaIn), обозначенных как $i = 1, 2$ соответственно, определяется следующим образом:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx}^i &= (a_i^{\text{exp}} - a_i^b)/a_i^b, \\ \varepsilon_{zz}^i &= (c_i^{\text{exp}} - c_i^b)/c_i^b, \end{aligned} \quad (3)$$

где c_i^{exp} — постоянная решетки вдоль гексагональной оси, нормальная к плоскости границы раздела слоев КЯ и барьера (интерфейса), a_i^{exp} — постоянная решетки, параллельная интерфейсу; c_i^b, a_i^b — те же параметры ненапряженных слоев. Для слоя $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ эти параметры являются функциями состава, которые описываются в модели Вегарда в виде $c_i^b = c_i(x)$ и $a_i^b = a_i(x)$. Для упругих деформаций связь между деформациями гексагональной решетки определяется уравнение [6–9]

$$\varepsilon_{zz}^i + p(x)\varepsilon_{xx}^i = 0, \quad (4)$$

где $p(x) = 2c_{13}(x)/c_{33}(x)$ — отношение Пуассона, $c_{13}(x), c_{33}(x)$ — упругие константы $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

Релаксацию напряжений между слоями обычно характеризуют изменением параметров решетки соседних слоев на гетерогранице или степенью релаксации

$$r_i = (a_i^{\text{exp}} - a_{i+1}^b)/(a_i^b - a_{i+1}^b). \quad (5)$$

Из анализа экспериментальных кривых качания для исследуемых образцов в рамках модели Парратта–Спериози [4,5], описывающей дифракцию рентгеновских лучей на многослойных периодических структурах, были определены следующие параметры: период активной области $\langle T \rangle$, толщины слоев $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ и GaN в активной области и величина средней деформации активной области относительно буферного слоя GaIn .

Введем величины, связывающие параметры эпитаксиальных слоев и параметры кривой качания, описывающие экспериментальные дифракционные кривые качания для исследуемых образцов,

$$A = \frac{r_e \lambda |F| t}{V \sqrt{|\gamma_0 \gamma_H|}}, \quad (6)$$

$$Y = -\sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_H|}} \frac{\pi V \sin(2\theta_B)}{r_e \lambda |F|} (\Delta\omega), \quad (7)$$

где r_e — радиус электрона, λ — длина волны рентгеновского излучения, γ_0 и γ_H — направляющие косинусы падающей и дифрагированной волны, θ_B — брэгговский угол. Разница $\Delta\omega$ между текущим значением θ падающего пучка и θ_B с учетом деформации дается выражением

$$\begin{aligned} \Delta\omega &= \theta - \theta_B + (\varepsilon^\perp \cos^2 \psi + \varepsilon^\parallel \sin^2 \psi) \text{tg } \theta_B \\ &\pm (\varepsilon^\perp - \varepsilon^\parallel) \sin \psi \cos \psi, \end{aligned} \quad (8)$$

где θ — угол падения по отношению к дифрагирующими плоскостям.

Угол падения, равный $\theta_B - \psi$, соответствует положительному знаку в выражении (8). Для угла падения, равного $\theta_B + \psi$, знак в выражении (8) отрицательный.

Нормированная амплитуда луча, дифрагированного такой многослойной структурой, может быть представлена в виде

$$E_N = i \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_H|}} \sum_{j=1}^N a_j e^{-i(A_j Y_j + \phi_j)} \frac{\sin A_j Y_j}{Y_j}, \quad (9)$$

где

$$a_j = \exp\left(-i\mu \frac{\gamma_0 + |\gamma_H|}{2|\gamma_0 \gamma_H|} \sum_{i=j+1}^N t_i\right),$$

$$a_N = 1, \quad \phi_j = 2 \sum_{i=1}^{j-1} A_i Y_i, \quad \phi_1 = 0, \quad (10)$$

ϕ — угол между дифракционными плоскостями и поверхностью, каждая плоскость j имеет свое собственное значение A_j и Y_j в соответствии с (6) и (7).

В простейшем случае многослойную структуру можно рассматривать как состоящую из двух слоев a и b , каждый из которых имеет свои значения A_a, Y_a и A_b, Y_b . Если пренебречь поглощением, то амплитуда дифрагированного луча для многослойной структуры с числом периодов M дается выражением

$$E_M = i \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_H|}} e^{-i\beta} F_s \frac{\sin(M(A_a Y_a + A_b Y_b))}{\sin(A_a Y_a + A_b Y_b)}, \quad (11)$$

где

$$\beta \equiv (M-1)(A_a Y_a + A_b Y_b) + A_a Y_a, \quad (12)$$

$$F_s \equiv \frac{\sin A_a Y_a}{Y_a} + e^{-i(A_a Y_a + A_b Y_b)} \frac{\sin A_b Y_b}{Y_b}, \quad (13)$$

F_s — структурный фактор периода многослойной структуры.

Числитель уравнения (13) дает нуль с периодичностью $\Delta\theta_M$ при выполнении условия

$$M\Delta(A_a Y_a + A_b Y_b) = \pi \quad (14)$$

или

$$\Delta\theta_M = \frac{\lambda |\gamma_H|}{M(t_a + t_b) \sin 2\theta_B}. \quad (15)$$

Используя (13), (6), (7), можно определить полную толщину многослойной структуры $M(t_a + t_b)$.

Знаменатель уравнения (13) дает пики при условии

$$A_a Y_a + A_b Y_b = n\pi. \quad (16)$$

Из (16) следует, что пики на дифракционной кривой можно обозначить как 0, ± 1 , ± 2 и т.д. Расстояние между

пиками $\Delta\theta_p$ позволяет определить период многослойной структуры p

$$p \equiv t_a + t_b = \frac{\lambda |\gamma_H|}{\Delta\theta_p \sin 2\theta_B}. \quad (17)$$

Пик многослойной структуры нулевого порядка находится на расстоянии $\Delta\theta_0$ от пика буферного слоя, тогда из (16) имеем

$$\Delta\theta_0 = -k_1 \langle \epsilon^\perp \rangle, \quad (18)$$

где усреднение взято по периоду многослойной структуры.

Амплитуда пика n -го порядка пропорциональна структурному фактору многослойной структуры, который можно определить из уравнения (16). Тогда для пика n -го порядка имеем

$$F_{sn} = \frac{\sin A_a Y_{an}}{A_a Y_{an}} \left(A_a + \frac{A_b}{1 - (n\pi/A_a Y_{an})} \right). \quad (19)$$

Поскольку Y_{an} связано с Y_{a0} посредством (17) и (7), а выражение (19) зависит только от A_a, A_b и Y_{ab} , для нулевого пика многослойной структуры при $n = 0$ выражение (19) сводится к виду

$$F_{s0} = \frac{\sin A_a Y_{a0}}{A_a Y_{a0}} (A_a + A_b) \approx (A_a + A_b), \quad A_a Y_{a0} \ll 1. \quad (20)$$

В соответствии с (20) амплитуда пика нулевого порядка определяется как $F_a t_a + F_b t_b$, где F_a и F_b — кристаллографические структурные факторы слоев a и b соответственно.

Таким образом, значение среднего периода $\langle T \rangle$ определяется по разности положений максимумов рефлексов активной области, т.е.

$$\sum AY = n\pi, \quad n = 0, 1, 2,$$

$$\langle T \rangle = \lambda \frac{|\gamma_h|}{\langle \Delta\theta_p \rangle \sin(2\theta_B)}, \quad (21)$$

где $\langle \Delta\theta_p \rangle$ — среднее значение разностей положений максимумов рефлексов активной области.

Определив из (21) среднее значение периода $\langle T \rangle = t_a + t_b$, можно рассчитать толщины слоев InGaN (t_a) и GaN (t_b), зная отношение интенсивностей максимумов нулевого (I_0) и первого (I_1) рефлексов

$$f_{01} = \sqrt{\frac{I_0}{I_1}}.$$

Используя выражения (20), (6) и (7) и предполагая, что значение $A_a Y_{an}$ мало, получаем соотношение параметров слоев в активной области и интенсивностей пиков на кривой качания [4,5]

$$\frac{A_a Y_{an}}{n\pi} = \frac{\frac{A_a}{A_b} - \frac{1}{f_{01} - 1}}{\frac{A_1}{A_b} + 1}. \quad (22)$$

Таблица 2. Параметры, определенные из анализа экспериментальных зависимостей кривых касания для исследуемых образцов

Параметр	Образец		
	A	B	C
Средний период CP (T), nm	15.03	–	14.3
Толщины слоев в CP t_1, t_2 , nm	4.16 (3.53)*	–	1.6
	10.87 (11.24)*		12.7
Деформация слоя CP относительно буферного слоя GaN	–0.0048	–0.0068	0.0015
Средняя концентрация In, at.%	10.5 (11–18)*	18.5	

Примечание. * В скобках приведены величины толщины слоев в активной области t_1 и t_2 , а также средняя концентрация индия в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, определенные из обработки экспериментальных кривых касания с помощью стандартного программного обеспечения LEPTOS.

Величина средней деформации активной области относительно буферного слоя GaN определяется по положениям максимумов рефлексов GaN и нулевого рефлекса $\Delta\theta_0$

$$-\Delta\theta_0 = \langle \varepsilon^\perp \rangle \text{tg}(\theta_B). \quad (23)$$

На основе приведенной выше модели для исследуемых образцов были определены величины периода активной области и толщины слоев InGaN и GaN, а также значения деформации активной области относительно буферного слоя GaN (табл. 2).

Как видно из табл. 2, толщины слоев в активной области t_1 и t_2 для образца A (табл. 1), определенные с помощью предложенной методики анализа экспериментальных кривых касания и с помощью стандартного программного обеспечения рентгеновского дифрактометра BRUKER DISCOVER D8 (LEPTOS), находятся в удовлетворительном согласии.

Разработанная методика позволяет определить толщины t_1 и t_2 для образца C с более сложной кривой касания (рис. 4), поскольку образец C содержит в активной области слои InGaN, разделенные барьерами AlGaIn, в отличие от образца A (табл. 1). Отсутствие рефлексов сверхструктуры на кривой касания образца B (рис. 3), по-видимому связанное с нарушением периодичности вдоль гексагональной оси c , а также с высокой дефектностью слоев, не позволило определить толщины t_1 и t_2 .

Величина средней концентрации In в слоях $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ в активной области образца A в соответствии с (23) [10] составила 10.5 at.%, что находится в хорошем согласии с данными LEPTOS, согласно которым эта величина в активной области является градиентной и изменяется от 11 до 18 at.%. Средняя концентрация In в слоях $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ образца B в соответствии с (23) составила 18.5 at.%. Как и при расчете толщин t_1 и t_2 , для образца B не удается определить среднюю концентрацию индия с помощью LEPTOS.

Таким образом, приведенная методика позволяет получать структурные параметры, такие как период и толщины слоев, а также значения деформации активной области относительно буферного слоя GaN из анализа сложных кривых касания.

4. Модель для описания энергии электронных переходов

Анализ положения максимума ФЛ в структурах с ультратонкими слоями $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ был выполнен в рамках модели, которая описывает энергию перехода как функцию толщины слоя $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ с учетом эффектов квантового ограничения, спонтанного и пьезоэлектрических полей при различном составе индия [11]. Выражение для энергии электронных переходов имеет вид

$$E_{tr} = E_g + E_{\text{conf}} - E_p, \quad (24)$$

где E_g — энергия ширины запрещенной зоны объемного $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, E_p — энергия поля поляризации, E_{conf} — энергия квантового ограничения.

Модель включает в себя энергии квантового ограничения и поля поляризации, которые учитывают три основных параметра структуры, содержащей квантовые точки (КТ) $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ [2,3], а именно размер КТ, деформацию, возникающую между слоями $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ и буфером GaN, а также спонтанную и пьезополяризацию.

Для оценки энергии квантового ограничения была использована сферически-симметричная модель КТ, предложенная Брусом для расчета КТ CdS [12]. В этой модели величина энергии квантового ограничения определяется диаметром КТ, диэлектрическими постоянными и эффективными массами электронов и дырок

$$E_{\text{conf}} \cong \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* r^2} - \frac{1.8e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r} - \frac{0.124e^4}{\hbar^2 m^* (4\pi\epsilon\epsilon_0)^2}, \quad (25)$$

где $m^* = (m_e^{-1} + m_h^{-1})^{-1}$ — приведенная эффективная масса, r — радиус КТ, \hbar — постоянная Планка, ϵ_0 — диэлектрическая постоянная вакуума, e — элементарный заряд электрона [13].

Наличие спонтанного и пьезоэлектрического полей является специфическим свойством III-нитридных материалов, выращенных вдоль оси c , за счет гексагональной симметрии. Полная энергия поляризации E_p , которая включает в себя спонтанную поляризацию (P^{SP}) и

пьезополяризацию, была рассчитана в соответствии с моделью [14]

$$E_p = eF^{(QW)}l_{QW}, \quad (26)$$

где напряженность внутреннего поля поляризации слоя $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ толщиной l_{QW}

$$F^{(n)} = \frac{A^{(n)} \sum_q l^{(q)} C^{(q)} B^{(q)} - C^{(n)} \sum_q l^{(q)} A^{(q)} / B^{(q)}}{B^{(n)} \sum_q l^{(q)} C^{(q)} / B^{(q)}}, \quad (27)$$

где

$$A = 2\varepsilon_{\parallel}(C_{13}e_{33} - C_{33}e_{31}) - C_{33}P^{SP}, \\ B = C_{33}\varepsilon_{33} + e_{33}^2, \quad C = C_{33}.$$

Компоненты тензора деформации ε_{\perp} и ε_{\parallel} , перпендикулярные и параллельные плоскости слоя $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, связаны соотношением

$$\varepsilon_{\perp} = -2\varepsilon_{\parallel} \frac{C_{13}}{C_{33}}. \quad (28)$$

Значения упругих постоянных C_{ij} , пьезопостоянных e_{ki} , эффективные массы электрона m_e , тяжелой дырки m_h , диэлектрическая постоянная ε твердого раствора $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ в выражениях (25)–(28) были получены линейной экстраполяцией в соответствии с законом Вегарда (табл. 3). Зависимость энергии ширины запрещенной зоны как функции локального состава твердого раствора $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ определяется в виде

$$E_g^{\text{InGa}} = xE_g^{\text{InN}} + (1-x)E_g^{\text{GaN}} - b(1-x)x, \quad (29)$$

где $b = 1.9 \text{ eV}$ — параметр аппроксимации [13].

На рис. 5 приведена расчетная зависимость энергии перехода E_{tr} (24) от толщины слоя $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ при различном содержании In в твердом растворе. Как следует из рис. 5, экспериментальные величины положения максимума ФЛ (рис. 5, штриховые линии), а также толщин слоев и средней концентрации индия в

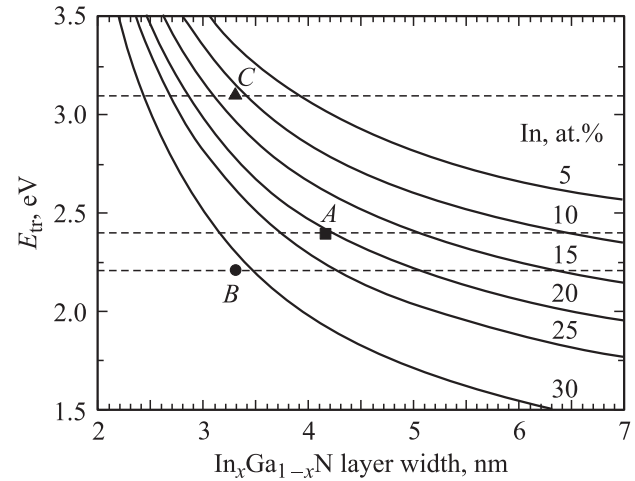


Рис. 5. Расчетная зависимость энергии перехода от толщины слоя $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ при различном содержании In в твердом растворе для образцов A, B и C.

твердом растворе $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, определенные из HRXRD (рис. 2–4), в образцах A, B и C находятся в удовлетворительном согласии с расчетными зависимостями энергии перехода E_{tr} от толщины слоя. Для образцов B и C величина толщины слоя $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ была получена в соответствии с данными просвечивающей электронной микроскопии и составила 3.3 nm [15].

Установлено, что экспериментально определенные величины положения максимума ФЛ, толщин слоев и концентрации индия в твердом растворе $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ находятся в удовлетворительном согласии с расчетной зависимостью энергии перехода от толщины слоя.

5. Заключение

В работе проведено исследование методами фотолюминесценции и рентгеновской дифракции высокого разрешения многослойных структур на основе соединений InGaN/GaN , излучающих в широком спектральном диапазоне от 1.23 до 2.21 eV. Определен период, толщины слоев и состав твердого раствора $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ в активной области. Разработан способ анализа экспериментальных кривых качания многослойных структур в рамках модели Парратта–Спериози, который позволяет уточнить структурные параметры и определить деформацию активной области.

Экспериментальные величины деформации активных областей для исследуемых образцов были использованы для расчета энергии поля поляризации. Получена расчетная зависимость энергии электронных переходов как функция толщин слоев InGaN с учетом энергий квантового ограничения и энергий спонтанной и пьезополяризации.

Показано, что экспериментальные значения положений максимумов фотолюминесценции согласуются с расчетными значениями энергий электронных переходов

Таблица 3. Параметры бинарных соединений GaN, InN [13]

Параметр	GaN	InN
a , Å	3.189	3.545
c , Å	5.185	5.703
E_g , eV	3.51	0.69
m_e	$0.18m_0$	$0.14m_0$
m_h	$1.61m_0$	$1.68m_0$
ε	10.4	14.6
P^{SP} , C/m ²	–0.034	–0.042
e_{31} , C/m ²	–0.3	–0.55
e_{33} , C/m ²	1.3	0.95
C_{11} , GPa	390	223
C_{12} , GPa	145	115
C_{13} , GPa	106	92
C_{33} , GPa	398	224
C_{44} , GPa	105	48

в рамках использованной модели, основанной на экспериментальных структурных параметрах.

Авторы благодарят М.А. Яговкину за проведение измерений методом рентгеновской дифракции высокого разрешения на оборудовании Северо-Западного регионального Центра коллективного пользования „Материаловедение и диагностика в передовых технологиях“.

Список литературы

- [1] T. Wtaker. LEDs magazine. Technology and application of light emitting diodes **13**, 20 (2007).
- [2] D.S. Sizov, V.S. Sizov, G.E. Onushkin, V.V. Lundin, E.E. Zavarin, A.F. Tsatsul'nikov, N.N. Ledentsov. Nanostructures physics and technology. St.Petersburg (2005). P. 294.
- [3] С.О. Усов, А.Ф. Цацуньников, В.В. Лундин, А.В. Сахаров, Е.Е. Заварин, Н.Н. Леденцов. ФТП **42**, 2, 187 (2008).
- [4] V.S. Speriosu, T. Vreeland, Jr. J. Appl. Phys. **56**, 1591 (1984).
- [5] L.G. Parratt. Phys. Rev. **95**, 359 (1954).
- [6] Р.Н. Кюгт, М.Л. Щеглов, В.Ю. Давыдов, А.С. Усиков. ФТП **46**, 2, 353 (2004).
- [7] L. Gorgens, O. Ambacher, M. Stutzmann, C. Miskys, F. Scholz, J. Off. Appl. Phys. Lett. **76**, 577 (2000).
- [8] S. Pereira, M.R. Correira, T. Monteiro, E. Pereira, E. Alves, A.D. Sequeira, N. Franco. Appl. Phys. Lett. **78**, 2137 (2001).
- [9] S. Pereira, M.R. Correira, E. Pereira, K.P. O'Donnell, E. Alves, A.D. Sequeira, N. Franco, I.M. Watson, C.J. Deatcher. Appl. Phys. Lett. **80**, 3913 (2002).
- [10] L.T. Romano. Appl. Phys. Lett. **73**, 1757 (1998).
- [11] Yen-Lin Lai, Chau-Pu Liu. Appl. Phys. Lett. **86**, 121 915/1-3 (2005).
- [12] L.E. Bruce. J. Chem. Phys. **80**, 4403 (1984).
- [13] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mhan. Appl. Phys. Lett. **89**, 5815 (2001).
- [14] U.M.E. Christmas, A.D. Andreev, D.A. Faux. J. Appl. Phys. **98**, 073 522/1-12 (2005).
- [15] S.O. Usov, A.F. Tsatsul'nikov, V.V. Lundin, A.V. Sakharov, E.E. Zavarin, D.S. Sizov, Yu.G. Musikhin, N.A. Bert, E.M. Arakcheeva, N.N. Ledentsov. Semicond. Sci. Technol. **22**, 528 (2007).